



МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

«СОГЛАСОВАНО»

Руководитель ОП

(подпись)

Голик С.С.

«УТВЕРЖДАЮ»



Заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики

(подпись)

Короченцев В.В.

«27» 05 2019 г.

РАБОЧАЯ ПРОГРАММА ДИСЦИПЛИНЫ

Симметрия физических систем

Направление подготовки – 03.03.02 Физика

Экспериментальная физика

Форма подготовки очная

курс 4 семестр 8

лекции 36 (час.)

практические занятия 36 час.

лабораторные работы не предусмотрена

в том числе с использованием МАО лек. _____ /пр. _____ /лаб. _____ час.

в том числе в электронной форме лек. _____ /пр. _____ /лаб. _____ час.

всего часов аудиторной нагрузки 72 час.

в том числе с использованием МАО _____ час.

самостоятельная работа 63 час.

в том числе на подготовку к экзамену 45 час.

курсовая работа / курсовой проект _____ семестр

зачет семестр

экзамен 8 семестр

Рабочая программа составлена в соответствии с требованиями образовательного стандарта, самостоятельно установленного ДВФУ, утвержденного приказом ректора от ____ . ____ . ____ № _____

Рабочая программа обсуждена на заседании кафедры общей и экспериментальной физики, протокол № 8 от «27» 05 2019 г.

Заведующий кафедрой общей и экспериментальной физики В.В. Короченцев
Составитель: д.х.н. Вовна В.И..

Владивосток
2019

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

СОДЕРЖАНИЕ РПУД

Симметрия физических систем

АННОТАЦИЯ	3
РАБОЧАЯ ПРОГРАММА УЧЕБНОЙ ДИСЦИПЛИНЫ	Ошибка!
Закладка не определена.	
КОНСПЕКТЫ ЛЕКЦИЙ	24
МАТЕРИАЛЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ	32
МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ	42
КОНТРОЛЬНО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ	59
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНТЕРНЕТ-ИСТОЧНИКОВ	68
ГЛОССАРИЙ	71
ДОПОЛНИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ	Ошибка! Закладка не определена.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

АННОТАЦИЯ

Рабочая программа учебной дисциплины (РПУД) «Симметрия физических систем» разработана для студентов 4 года (7 семестр) по направлению 03.03.02 «Физика», профиль «Экспериментальная физика». в соответствии с требованиями ОС ВО ДВФУ по данному направлению и «Положением об учебно-методических комплексах дисциплин образовательных программ высшего профессионального образования» ДВФУ 2012 г. (утверждено приказом и.о. ректора ДВФУ от 07.07.2015).

Дисциплина «Симметрия физических систем» входит в вариативную часть обязательных дисциплин математического и естественнонаучного цикла.

Общая трудоемкость освоения дисциплины составляет 4 зачетных единицы, 144 часа. Учебным планом предусмотрены лекционные занятия (26 часов), практические занятия (18 часов), самостоятельная работа студента (55 часов), контроль (45 часов). Дисциплина реализуется на 4 курсе в 7 семестре.

Содержание дисциплины охватывает следующий круг вопросов, реализуемых в трёх модулях: элементы теории симметрии, перечисление (описание) точечных групп, теорию представлений точечных групп, классификацию по симметрии собственных значений и собственных функций молекул в квантовой механике, задачу на определение симметрии колебаний молекул.

Первый модуль – **«Симметрия и понятие группы»** рассматривает элементы и операции симметрии, соответствующие каждому элементу, определение операции симметрии эквивалентной двум другим операциям, установление группы симметрии объекта, объединение операций симметрии в классы.

Во втором модуле рассматриваются **«Элементы теории представлений»**: неприводимые и приводимые представления, применение матриц, нахождение

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

характеров набора представлений, даваемых использованием набора координатных векторов как базиса, разложение приводимых представлений на неприводимые.

Третий модуль знакомит с примерами «**Применения теории групп и представлений**» к химическим связям и молекулярным колебаниям.

Дисциплина «**Симметрия физических систем**» логически и содержательно связана с такими курсами как «Теория групп», «Линейная алгебра», «Векторный и тензорный анализ», «Химия», «Атомная физика», «Квантовая теория», «Молекулярная спектроскопия».

Дисциплина направлена на формирование профессиональных компетенций выпускника:

- способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач (ПК-1);

РПУД включает в себя все компоненты, определённые указанным положением:

- аннотацию (на русском и английском языке);
- рабочую программу дисциплины (на русском и английском языке);
- краткие конспекты лекций;
- материалы для практических занятий (темы и задания для практических занятий);
- материалы для организации самостоятельной работы студентов (тексты заданий с методическими указаниями к самостоятельной работе, вопросы для самопроверки, список вопросов, выносимых на зачёт;
- контрольно-измерительные материалы (система тестов по темам, пакеты индивидуальных заданий, темы контрольных работ по теории);
- список литературы (в том числе Интернет-ресурсов);

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

–гlossарий;

–дополнительные материалы.

Достоинствами данного РПУД являются: использование электронной обучающей среды ДВФУ Blackboard, где размещены все материалы курса (**идентификатор курса FU50702-011200.62-TG-01**), возможность общения через сайт с преподавателем посредством Blackboard Collaborate, через журналы, блоги в этой среде, использование электронной почты. Представление лекций как презентаций в формате Power Point, применение других методов активного обучения помогают повысить мотивацию студентов к учёбе и облегчить усвоение материала. Использование возможностей анимации, фото- и видеоматериалов, молекулярных конструкторов делает курс более наглядным.

Цель и задачи дисциплины

Цель изучения курса: подготовить специалистов, способных применять в своей работе подходы теории групп, владеющих приёмами анализа научных результатов на основе свойств представлений групп.

Для достижения этой цели необходима постановка и решение следующих **задач**:

- формулировка идей, лежащих в основе анализа свойств симметрии разнообразных объектов;
- знакомство студентов с теоретико-групповыми подходами к анализу свойств симметрии простейших физических систем;
- на основании этих идей освоение способов получения и интерпретации информации о молекулярных системах;

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

– приобретение студентами практических навыков решения задач с помощью теории групп и представлений.

Место дисциплины в структуре ОП

Дисциплина «Симметрия физических систем» входит в вариативную часть обязательных дисциплин математического и естественнонаучного цикла.

Для усвоения материала по курсу «Симметрия физических систем» студенты должны владеть математическим аппаратом (дифференциальное и интегральное исчисление, векторная алгебра, теория матриц), определяемым образовательной программой.

Знания, умения и навыки, приобретенные в ходе изучения курса необходимы для выполнения выпускной квалификационной работы бакалавриата и продолжения образования в магистратуре по соответствующим специальностям.

Требования к результатам освоения дисциплины

Код и формулировка компетенции	Этапы формирования компетенции	
ПК-1 способность использовать базовые теоретические знания для решения профессиональных задач	Знает	основы теории групп и представлений
	Умеет	находить элементы и операции симметрии для конкретных систем, устанавливать принадлежность их к точечным группам, применять теорию представлений к описанию молекулярных свойств и процессов, применять полученную теоретическую базу, пользоваться таблицами неприводимых представлений для решения конкретных практических задач, грамотно работать с научной

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

		литературой с использованием новых информационных технологий;
		выками вычисления характеров приводимых представлений, приёмами разложения приводимых представлений на неприводимые, анализу физического смысла полученных результатов

Для формирования вышеуказанных компетенций в рамках дисциплины «Название» применяются следующие методы активного/ интерактивного обучения: «лекция-беседа», «дискуссия».

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

I. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ ДИСЦИПЛИНЫ (26 час.)

Модуль 1. Симметрия и понятие группы (6 час.)

1.1. Элементы и операции симметрии

Элементы симметрии молекулы, операции симметрии, соответствующие каждому элементу. Нахождение операции симметрии эквивалентной двум другим операциям. Таблица умножения операций симметрии.

1.2. Точечные группы

Понятие точечной группы симметрии, установление принадлежности молекулы к точечной группе, понятие класса, объединение наборов операций симметрии в классы.

Модуль 2. Элементы теории представлений (10 час.)

2.1. невырожденные представления

Понятие представлений. Образование невырожденного представления для описания влияния операций группы симметрии вдоль выделенного направления. Разложение приводимого представления на его неприводимые составляющие.

2.2. Применение матриц

Объединение двух матриц. Матрица для описания заданного преобразования характер матрицы, представляющей операцию симметрии, в заданном базисе.

2.3. Вырожденные представления

Характеры набора представлений, даваемых использованием набора вырожденных векторов как базиса.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Модуль 3. Применение теории групп и представлений (10 час.)

3.1. Применение к химическим связям

Наборы гибридных орбиталей, с заданными направленностями. Удобные для π -связей орбитали в молекуле. Симметрия молекулярных орбиталей ЛКАО. Простые корреляционные диаграммы МО.

3.2. Применение к молекулярным колебаниям

Признаки симметрии нормальных колебаний для молекулы с заданной симметрией. Число активных колебаний в ИК и в КР.

II. СТРУКТУРА И СОДЕРЖАНИЕ ПРАКТИЧЕСКОЙ ЧАСТИ

КУРСА (18 час.)

Практические занятия (18 час.)

Тема 1. Симметрия и понятие группы

Занятие 1. Элементы и операции симметрии

- Нахождение элементов симметрии молекулы
- Определение операций симметрии, соответствующих каждому элементу
- Нахождение операции симметрии, эквивалентной двум другим операциям

Занятие 2. Точечные группы

- Установление точечной группы симметрии, к которой принадлежит данная молекула
- Установление факта, что полный набор операций симметрии молекулы образует группу
- Объединение наборов операций симметрии в классы

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Занятие 3. Тестирование по Теме 1. Самостоятельная работа: индивидуальные задания.

Тема 2. Элементы теории представлений

Занятие 4. Неприводимые представления

- Образование невырожденного представления для описания влияния операций группы симметрии вдоль направления, скажем, x .
- Разложение приводимого представления на его неприводимые составляющие

Занятие 5. Применение матриц

- Объединение двух матриц
- Составление матрицы для описания заданного преобразования
- Нахождение характера матрицы, представляющей операцию симметрии, в любом заданном базисе

Занятие 6. Приводимые представления

- Определение характеров набора представлений, даваемых использованием набора вырожденных векторов как базиса.

Занятие 7. Тестирование по теме 2. Выполнение индивидуальных заданий.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Тема 3. Применение теории групп и представлений

Занятие 8. Применение к химическим связям

- Нахождение наборов гибридных орбиталей, с заданными направленностями
- Определение наиболее удобные для π -связей орбитали в молекуле
- Определение симметрии молекулярных орбиталей ЛКАО
- Составление простых корреляционных диаграмм МО

Занятие 9. Применение к молекулярным колебаниям

- Определение признаков симметрии нормальных колебаний для молекулы с заданной симметрией
- Отыскание числа активных колебаний в ИК и в КР
- Нахождение числа активных колебаний в характеристическом диапазоне ИК и КР спектра молекулы

По итогам занятия 9 выполняется индивидуальное домашнее задание типа «Назначение», которое оформляется в электронном виде и отправляется на проверку через сайт Blackboard ДВФУ.

III. КОНТРОЛЬ ДОСТИЖЕНИЯ ЦЕЛЕЙ КУРСА

Текущий контроль. Предусматривает учет посещения студентами занятий, оценку своевременности и качества выполнения тестов, индивидуальных заданий, лабораторных работ. Предусмотрены аудиторские и домашние контрольные мероприятия. В течение семестра студенты отвечают на вопросы для самопроверки по лекциям, выполняют индивидуальные задания, проходят текущее электронное тестирование. Пропущенный лекционный материал самостоятельно прорабатывается студентом с отчетностью в виде составления

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

подробного конспекта и/или выполнения дополнительного практического задания по пропущенной теме.

Промежуточная аттестация. Выражается в рейтинговых баллах, которые рассчитываются автоматически и доступны преподавателю в «Центре оценок», а студенту (индивидуально) в «Результатах работ» - на странице курса в LMS в течение семестра.

Итоговая аттестация. В конце семестра студенты выполняют индивидуальное домашнее задание. Подведение окончательных итогов по курсу проводится на заключительной стадии в форме зачёта с учётом рейтинговых баллов текущего тестирования.

Критерии оценки знаний студентов по курсу.

Требуется обязательное посещение аудиторных занятий и выполнение контрольных мероприятий. Итоговая оценка знаний производится первоначально по 100-балльной шкале. Для зачёта необходимо по итогам текущего и итогового тестирования набрать не менее 80% от максимально возможного числа баллов.

	Контролируемые модули/разделы / темы дисциплины	Коды и этапы формирования компетенций		Оценочные средства - наименование	
				текущий контроль	промежуточная аттестация
Симметрия в физике		(ОПК-1)	Знает	Устный опрос (УО-1)	Экзамен Вопросы 1-16
			Умеет	Устный опрос (УО-1) Контрольная работа (ПР-2) Тест (ПР-1)	Экзамен Вопросы 1-16
			Владеет	Устный опрос (УО-1) Контрольная работа (ПР-2)	Экзамен Вопросы 1-16

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

IV. УЧЕБНО-МЕТОДИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Сайт курса на платформе Blackboard ДВФУ: **идентификатор курса FU50702-011200.62-TG-01.**
2. Компьютерные презентации в формате PowerPoint.
3. Методические указания к самостоятельной работе.

Основная литература

1. Иванов Е.Н. Симметрия физических систем и её применение в физике. Учебное пособие. - М: МИЭТ. - 2006. - 160 с.
<http://staff.ulsu.ru/moliver/ref/qc/ivan06.pdf>
2. Сенашов В.И. Основы теории групп. Версия 1.0 [Электронный ресурс]: сб. задач/ В.И.Сенашов, А.В. Тимофеев, О.В.Пашковская. - Электрон. дан. (3 Кб). - Красноярск: ИПК СФУ, 2008.
http://ruthenia.info/txt/pavlo/179/senashov_2008.pdf

Дополнительная литература

3. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. В 2- томах. Пер. с англ. М.: Мир. – 1983. –
4. Дмитриев И.С. Симметрия в мире молекул. М. - Химия. - 1976. - 126 с.
5. Vincent A. Molecular Symmetry and Symmetry of Physical Systems. A Programmed Introduction to Chemical Applications. John Wiley & Sons. - 1977. - 156 p.
6. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Учебное пособие. Ростов-наДону: «Феникс». – 1977. – 272 с.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Интернет-источники

1. Сайт курса на платформе Blackboard ДВФУ,
идентификатор курса: **FU50702-011200.62-TG-01**. Режим доступа – по
паролю единой учётной записи университета.
Внешние Интернет-источники приведены там же в форме гиперссылок в
разделе «Дополнительные материалы».
2. Программа GAP: <http://www.gap-system.org/ukrgap/Gap-dist.htm>
3. Точечные группы симметрии:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/index.html>
4. Студенческий ресурс из книги “Physical Chemistry”, Atkins & de Paula:
<http://www.oup.com/uk/orc>
http://www.oup.com/uk/orc/bin/9780198700722/01student/tables/tables_for_group_theory.pdf
5. Набор ссылок на другие ресурсы о симметрии:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/links.html>
6. Таблицы характеров <http://symmetry.jacobs-university.de/>
7. Там же - программа для on-line разложения приводимых представлений на
неприводимые:
<http://symmetry.jacobs-university.de/cgi-bin/group.cgi?group=603&option=4> :
8. Короткое видео о симметрии и группах: <http://youtu.be/ylAXYqgbp4M>
9. Видеолекция о свойствах групп (32 мин. англ. яз.)
<http://youtu.be/WwndchnEDS4>

V. ТЕХНИЧЕСКИЕ СРЕДСТВА ОБЕСПЕЧЕНИЯ ДИСЦИПЛИНЫ

1. Проектор+ноутбук для демонстрации презентаций.
2. Молекулярные конструкторы.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

3. Раздаточные материалы (схемы, таблицы, рисунки, диаграммы и т.д.).

4. САМОСТОЯТЕЛЬНАЯ РАБОТА СТУДЕНТОВ (55 час.)

1. Ответы на вопросы для самоподготовки.
2. Выполнение домашних заданий, подготовка к тестам, вебинарам и контрольным работам.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

SYLLABUS

for the discipline

“Symmetry of Physical Systems”

Department: Theoretical and Experimental Physics

Lecturer: prof. Vovna Vitalii Ivanovich

The Syllabus has been made in accordance to requirements of the State Standard for higher professional education and meets mandatory minimum requirements for general academic curriculum of special education in major 011200.62 “physics”.

ANNOTATION OF THE COURSE

A contents of the course “Symmetry of Physical Systems” meets the requirements of the State standard for higher professional education. To comprehend this course students need to master all the disciplines of physical and mathematical courses included in curriculum. In philosophical and methodological sense its relation to “Quantum Mechanics”, “Atomic Physics”, “Group Theory”, “Chemical Compounds Structure”, “Chemistry”, “Molecular Spectroscopy” is essential.

Objectives and Goals of the discipline

A **final goal** is to educate specialists, which can use ideas of the Symmetry of Physical Systems in their practice, have skills for analysis of scientific results by means of group representations.

To come to this goal, the following **objectives** are to be achieved:

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

- statement of ideas that make foundation for analysis of symmetry properties of different objects;
- making students to learn about Symmetry of Physical Systems approaches to analysis of the simplest physical systems;
- basing on these ideas mastery of the ways of obtaining and understanding information on molecular systems;
- getting practical habits of solving problems by means of group and representation theory.

Position of the Discipline in the Curriculum Structure

The “Symmetry of Physical Systems” course is a part of alternating section of the mandatory disciplines of mathematical and natural scientific academic curriculum.

To comprehend the course material, students must have mathematical background (like Calculus, Vector Algebra, Matrix Theory) according to their educational curriculum.

Knowledge, skills and habits are prerequisites for bachelor thesis as well as for the next mastership education.

Cognizance of Students as a Result of This Course

The discipline aims to create the following professional competences:

- ability to use basic theoretical knowledge for solving professional problems (ПК-1);

As a result of study of this discipline a student has to:

know: principles of group and representation theory.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

manage: to recognize symmetry elements and operations for certain systems, to attribute them to point groups, to apply Symmetry of Physical Systems to description of molecular properties and processes, to apply this theoretical tool, to use irreducible representation tables for practical problems solutions, skillfully use scientific sources of new informational technologies;

master: basic methods of irreducible representation characters, practices of reducing representations, physical sense analysis of obtained results.

I. STUSCTURE AND CONTENTS OF THE THEORETICAL PART OF THE COURSE (26 hours)

Module 1. Symmetry and Group Ideas (6 hours)

1.1. Symmetry elements and operations

Symmetry elements, symmetry operations related to the elements. Determination of operation equivalent to two other operations. Multiplication table for symmetry operations.

1.2. Point groups

Point group conception, determination of the point group to which a molecule belongs, idea of class, arrangement a set of operations into classes.

Module 2. Representation Theory Principles (10 hours)

2.1. Non-degenerate representations

Representation concept. Formation of non-degenerate representation for description of the effect of the symmetry operations on a certain direction. Reduction of reducible representations.

2.2. Matrices application

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Combination of two matrices. A matrix to perform a given transformation. Determination of a matrix character representing a symmetry operation in any given basis.

2.3. *Degenerate representations.*

- Characters of a set of representations generated by using a set of degenerate vectors as a basis.

Module 3. Applications of Group and Representation Theory (10 hours)

3.1. *Applications to chemical bonding*

Sets of hybrid orbitals with given directional properties. Orbitals suitable for π -bonding in a molecule. Finding of the symmetries of LCAO molecular orbitals. Constructing of simple MO diagrams.

3.2. *Applications to molecular vibrations*

Symmetry species of the normal modes of vibration of a molecule of a given symmetry. Determination of numbers of active infrared vibrations and Raman active vibrations.

II. STUSCTURE AND CONTENTS OF THE PRACTICAL PART OF THE COURSE (18 hours)

Practical subjects

Subject 1. Symmetry and Group Ideas (6 hours)

Unit 1. Symmetry elements and operations

- Finding of symmetry elements, symmetry operations related to the elements.
- Determination of operation equivalent to two other operations.
- Determination of multiplication table for symmetry operations.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Unit 2. Point groups

- Determination of the point group to which a molecule belongs
- Confirmation that the complete set of symmetry operations of a molecule constitutes a group
- Arrangement a set of operations into classes

Unit 3. Testing on Subject 1. Self supporting work: individual tasks.

Subject 2. Representation Theory Principles (10 hours)

Unit 4. Non-degenerate representations

- Formation of non-degenerate representation for description of the effect of the symmetry operations on a certain direction
- Reduction of reducible representations

Unit 5. Matrices application

- Combination of two matrices.
- A matrix to perform a given transformation, matrix character representing a symmetry operation in any given basis.
- Determination of a matrix character representing a symmetry operation in any given basis.

Unit 6. Degenerate representations

- Determination of the characters of a set of representations generated by using a set of degenerate vectors as a basis.

Unit 7. Testing of the Subject 2. Individual tasks.

Subject 3. Applications of Group and Representation Theory (10 hours)

Unit 8. Applications to chemical bonding

- Determination of sets of hybrid orbitals with given directional properties.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

- Determination of orbitals suitable for π -bonding in a molecule.
- Finding of the symmetries of LCAO molecular orbitals.
- Constructing of simple MO diagrams.

Unit 9. **Applications to molecular vibrations**

- Determination of symmetry species of the normal modes of vibration of a molecule of a given symmetry.
- Determination of numbers of active infrared vibrations and Raman active vibrations.

To resume the Unit 9 an individual task “Assignment” is to be completed and sent by means of cite Blackboard for grading.

III. **CONTROLE OF ACHIVING OF THE OBJECTIVES OF THE COURSE**

Current Control. Watching of attendance, grading of timeliness and quality of tasks, tests and home assignments are supposed. There are both class and home tasks to submit. During the term students answer questions for self-testing, do individual tasks and on-line computer testing.

Intermediate Grading. It is expressed in rating grades that are calculated automatically and open at the “Grading Center” for instructor and at “Work Results” for a student (privately) – on the course page in LMS – currently during the term.

Final Grading. At the end of the term students submit their individual home assignment. Final summarization of the course grades occurs at the last week in the form of “passed/not passed” proceeding from current rating grades.

Student Knowledge Grading Criteria for the Course .

Attendance of all lectures and passing all tests is mandatory. Final examination grade is based on 100 scale. The grade “passed” is given provided that all the assignments of tasks have been accomplished and successful current and final tests and

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

reports have been passed. To get “passed” students must have more than 80% of maximum count.

IV. TEACHING AND LEARNING AIDS FOR THE COURSE

1. Course site at LMS Blackboard FEFU ID: [FU50702-011200.62-TG-01](https://lms.fefu.ru/course/view.php?id=FU50702-011200.62-TG-01).
2. Power Point presentations.
3. Teaching aids for self-supporting studies.

Basic Literature

1. Иванов Е.Н. Симметрия физических систем и её применение в физике. Учебное пособие. - М: МИЭТ. - 2006. - 160 с.
<http://staff.ulsu.ru/moliver/ref/qc/ivan06.pdf>
2. Сенашов В.И. Основы теории групп. Версия 1.0 [Электронный ресурс]: сб. задач/ В.И.Сенашов, А.В. Тимофеев, О.В.Пашковская. - Электрон. дан. (3 Кб). - Красноярск: ИПК СФУ, 2008.
http://ruthenia.info/txt/pavlo/179/senashov_2008.pdf

Supplementary Literature

3. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. В 2- томах. Пер. с англ. М.: Мир. – 1983. –
4. Дмитриев И.С. Симметрия в мире молекул. М. - Химия. - 1976. - 126 с.
5. Vincent A. Molecular Symmetry and Symmetry of Physical Systems. A Programmed Introduction to Chemical Applications. John Wiley & Sons. - 1977. - 156 p.
6. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Учебное пособие. Ростов-наДону: «Феникс». – 1977. – 272 с.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

V. AIDS AND APPLIANCES

1. Projector + PC to demonstrate presentations
2. Molecular kits.
3. Hand-out materials (drafts, tables, pictures, diagrams and so on).

Internet Sources

1. Course Site at the LMS Blackboard FEFU,
Course ID: **FU50702-011200.62-TG-01**. Enter by password and login of the University.
2. PC Program GAP: <http://www.gap-system.org/ukrgap/Gap-dist.htm>
3. Point groups:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/index.html>
4. Resource for students from the book “Physical Chemistry”, Atkins & de Paula:
<http://www.oup.com/uk/orc>
http://www.oup.com/uk/orc/bin/9780198700722/01student/tables/tables_for_group_theory.pdf
5. Other links on symmetry:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/links.html>
6. Character tables: <http://symmetry.jacobs-university.de/>
7. Program for representations reduction:
<http://symmetry.jacobs-university.de/cgi-bin/group.cgi?group=603&option=4> :
8. Brief video on symmetry and groups: <http://youtu.be/ylAXYqgbp4M>
9. Video Lecture on group properties: (32 min. Eng.)
<http://youtu.be/WwndchnEDS4>

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Дальневосточный федеральный университет»
(ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

КОНСПЕКТЫ ЛЕКЦИЙ

по дисциплине

«Симметрия физических систем»

Направление подготовки – 03.03.02 Физика

Экспериментальная физика

Форма подготовки очная

<

г. Владивосток
2019

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Применение **методов активного обучения**: все лекции являются лекциями-визуализациями (Power Point), используется также приём «лекция-беседа».

Краткие конспекты

Лекция 1. Элементы и операции симметрии

Свойства симметрии молекулы можно описать, перечисляя все её элементы симметрии. Молекула обладает данным элементом симметрии, если применение соответствующей операции симметрии приводит молекулу к состоянию, неотличимому от исходного. Существует пять типов элементов симметрии, позволяющих установить симметрию любой из молекул:

E	тождественное преобразование
C_n	ось вращения порядка n
σ	плоскость симметрии
i	центр инверсии
S_n	зеркально-поворотная ось порядка n

Каждому из элементов E , σ , i соответствует одна операция симметрии, а элементам C_n и S_n соответствует несколько операций, т.к. применение кратное применение такой операции можно считать самостоятельной операцией симметрии, например, элементу C_3 соответствуют операции C_3 и C_3^2 . Некоторые из таких кратных операций дают такой же результат как однократное применение какой-либо другой операции. В этих случаях принимают во внимание только однократную операцию, например, $C_4^2 = C_2$: учитывается только C_2 .

Если последовательно применить две каких-либо операции, результат будет тот же, что при однократном применении какой-то третьей операции.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Поэтому можно составить таблицу умножения для операций симметрии молекулы, чтобы показать, как операции могут применяться совместно. При записи выражений, описывающих последовательное применение операций симметрии надо помнить, что запись $\sigma \times \sigma' \times C_4$ означает применение вначале C_4 , затем σ' и затем σ .

Лекция 2. Точечные группы

При объединении операций симметрии любых геометрических объектов в математические группы соблюдаются следующие правила:

- 1) произведение двух элементов группы, а также квадрат любого элемента являются также элементами этой группы;
- 2) должен существовать тождественный элемент;
- 3) комбинации элементов обладают свойством ассоциативности, т.е. $(AB)C = A(BC)$;
- 4) для каждого элемента группы найдётся обратный ему элемент, принадлежащий этой же группе, т.е. если A принадлежит группе, то и A^{-1} тоже является элементом этой группы, причём $AA^{-1} = E$.

Операции симметрии не обязательно должны коммутировать, т.е. AB не всегда равно BA .

Чтобы молекулу можно отнести к точечной группе не обязательно каждый раз перечислять все её операции симметрии; достаточно найти ключевые элементы. Большинство обозначений групп симметрии состоят из трёх символов, например,

$$C_{4v}, \quad C_{2h}, \quad D_{3h}, \quad D_{6d}.$$

Эти символы имеют следующий смысл:

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

1) число показывает порядок главной (наивысшего порядка) оси. Эту ось обычно располагают вертикально;

2) заглавная буква D используется для главной оси порядка n, если имеется n осей 2 порядка, перпендикулярных ей, в остальных случаях ось вращения обозначается буквой C;

3) строчная буква h употребляется, если имеется горизонтальная плоскость. Если в наличии n вертикальных плоскостей, то используется буква v для осей C и буква d для групп D. (h обладает преимуществом над v или d. Если вертикальные или горизонтальные плоскости отсутствуют, то маленькая буква опускается.

Схема классификации точечных групп симметрии – в разделе «Дополнительные материалы».

Лекция 3. Невырожденные представления

Операции симметрии группы можно представить в виде наборов чисел, называемых неприводимым представлениями, которые:

- 1) представляют действие операций группы на определённые пространственные характеристики, например x, xz, Rx и т.д.;
- 2) умножаются по тем же правилам, что и операции этой группы.

Применение теории групп часто включает получение приводимого представления как сумму неприводимых представлений из таблицы характеров. Это приводимое представление раскладывается на неприводимые либо интуитивно, либо с помощью формулы:

$$a = \frac{1}{h} \sum \chi_R \times \chi_I \times N, \quad \text{где}$$

a – показывает, сколько раз неприводимое представление содержится в приводимом;

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

h – порядок группы (= число операций в группе);

χ_R – характер приводимого представления;

χ_I – характер неприводимого представления;

N – число операций симметрии в классе.

Суммирование производится по классам.

У некоторых точечных групп (у которых есть оси порядка выше второго) операция симметрии может приводить к смешиванию пространственных свойств. Такие свойства будут вырожденными, и операция симметрии будет записываться матрицей, называемой вырожденным представлением.

Лекция 4. Применение матриц

Матрица – совокупность чисел, содержащих некоторое число рядов и строк. В противоположность детерминанту, у неё нет численного значения.

Две матрицы (X) и (Y) можно объединить, если число столбцов матрицы (X) равно числу строк матрицы (Y). При выполнении этого условия матрицы являются соответствующими (конформными).

Комбинация матриц получается перемножением рядов первой матрицы на строки другой матрицы. Элемент r -ого ряда s -й строки произведения образован перемножением элементов r -го ряда первой матрицы на s -й столбец второй матрицы и суммированием этих произведений, например,

$$\begin{pmatrix} 1 & 4 \\ 6 & 8 \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 5 & 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \times 2 + 4 \times 5 & 1 \times 3 + 4 \times 7 \\ 6 \times 2 + 8 \times 5 & 6 \times 3 + 8 \times 7 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 22 & 31 \\ 52 & 74 \end{pmatrix}$$

Операция симметрии преобразует набор векторов в новый набор векторов. Если исходный и новый наборы записаны как матрицы-столбцы, то операция может быть представлена квадратной матрицей, которая объединяет эти две.

Характер квадратной матрицы – это сумма чисел её главной диагонали. Для матрицы, представляющей операцию, характер есть множитель, с которым

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

векторы базиса преобразуются в себя при этой операции (он может быть отрицательным, если направление меняется на противоположное).

Лекция 5. Вырожденные представления

Если группа содержит ось порядка 3 или выше, то применение операций симметрии приводит к преобразованию одного направленного свойства в другое. Если с этими свойствами связана энергия, например, энергия p_x и p_y орбиталей, эти энергии должны быть одинаковыми, т.е. симметрия говорит нам прямо, что свойства, связанные с направлениями, которые перемешиваются из-за симметрии, должны быть вырожденными.

Если два направленно-зависимых свойства смешиваются при операциях симметрии, то такая операция может быть описана матрицей, чей характер приводится таблице характеров. Такое смешивание направленно зависимых операций приводятся в скобках в таблице характеров, например, (x,y) ; (xz,yz) и т.д.

Размерность вырожденного представления равна характеру эквивалентной матрицы.

Однократно вырожденные представления обозначаются A и B.

Дважды вырожденные представления обозначаются E.

Трижды вырожденные представления означаются T.

Лекция 6. Применение к химическим связям

Применение теории групп ко многим химическим задачам можно суммировать в виде следующих трёх правил:

- 1) используйте подходящий базис для составления приводимого представления точечной группы;
- 2) разложите это представление на неприводимые;

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

3) интерпретируйте результаты.

Эти приложения требуют определённых базисов:

- 1) гибридные орбитали – стрелочки, символизирующие связи;
- 2) орбитали π -связей – стрелочки (двойные для пары атомов), символизирующие связи;
- 3) МО ЛКАО.

Лекция 7. Приложение к молекулярным колебаниям

Приложение теории групп к молекулярным колебаниям можно свести к трём правилам:

- 1) Используйте подходящий базис, чтобы найти набор характеров приводимых представлений точечной группы;
- 2) Разложите приводимое представление на неприводимые;
- 3) Интерпретируйте полученные результаты.

Полный колебательный анализ начинается с выбора декартовых векторов смещений каждого атома в качестве базиса. Затем необходимо вычесть неприводимые представления трансляций и вращений, чтобы найти неприводимые представления колебаний.

Если атом смещается при операции симметрии, этот атом не добавляет ничего к характеру результирующего приводимого представления. Если, однако, атом не смещается при операции симметрии, то вклад этого атома в характер приводимого представления даётся величиной $f(R)$. Таблица значений $f(R)$ для разных операций симметрии приведена в приложении.

Неприводимые представления, к которым принадлежат характеристические колебания (например, валентные C–O), могут быть получены, если принять растяжение связи C–O в качестве базиса этого представления. В этом случае нет

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

необходимости вычитать трансляции и вращения, потому что они не входят в базис.

Молекулярные колебания являются:

- 1) активными в ИК-поглощении, если они преобразуются по тому же неприводимому представлению, что и x , y или z ;
- 2) активными в КР, если они принадлежат к тому же неприводимому представлению, что xy , z^2 , $x^2 - y^2$ и т.д.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего профессионального образования
 «Дальневосточный федеральный университет»
 (ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

МАТЕРИАЛЫ ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЙ

по дисциплине

«СИММЕТРИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ»

Направление подготовки – **03.03.02 Физика**

Экспериментальная физика

Форма подготовки очная

г. Владивосток
2018

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Материалы практических занятий с примерами задач

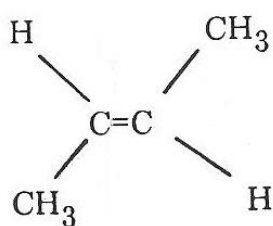
Тема 1. Элементы и операции симметрии

Цели

Научиться

- Находить элементы симметрии молекулы
- Определять операции симметрии, соответствующие каждому элементу
- Находить операцию симметрии эквивалентную двум другим операциям

1. Составьте таблицу умножения для операций симметрии молекулы транс-бут-2-ена. Применяйте вначале операцию верхней строки, затем – операцию левого столбца:



	E	C ₂	σ	i
E				
C ₂				
σ				
i				

Ответ:

	E	C ₂	σ	σ'
E	E	C ₂	σ	i
C ₂	C ₂	E	i	σ
σ	σ	i	E	C ₂
σ'	i	σ	C ₂	E

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

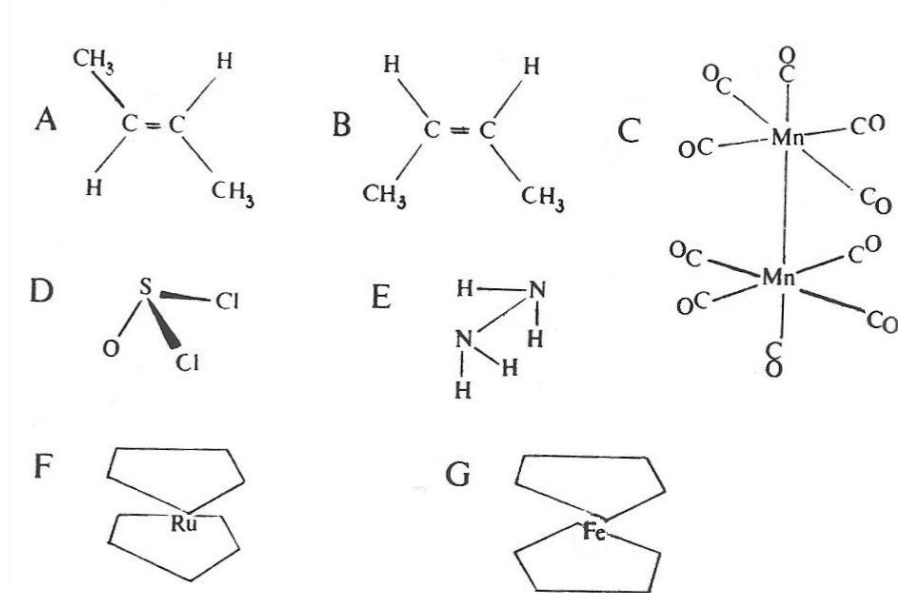
Тема 2. Точечные группы

Цели

Научиться

- Устанавливать точечную группу симметрии, к которой принадлежит данная молекула
- Убедиться, что полный набор операций симметрии молекулы образует группу
- Объединять наборы операций симметрии в классы

1. С помощью схемы для определения точечных групп определите, к каким группам принадлежат следующие молекулы:



Ответ:

A. C_{2h} B. C_{2v} C. D_{4d} D. C_s E. C_2 F. D_{5h} G. D_{5d}

2. Группа D_{3h} включает операции

E C_3 C_3^2 C_2 C'_2 C''_2 σ_h S_3 S_3^5 σ_v σ'_v σ''_v

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Объедините эти операции в шесть классов.

Ответ: $E, 2C_3, 3C_2, \sigma_h, 2S_3, 3\sigma_v$

Тема 3. невырожденные представления

Цели

Научиться

- Образовывать невырожденное представление для описания влияния операций группы симметрии вдоль направления, скажем, x .
- Разлагать приводимое представление на его неприводимые составляющие

Разложите следующие приводимые представления на неприводимые:

А

	C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
Γ_{12}		6	0	-2
Γ_{13}		9	0	-1

Ответ: $\Gamma_{12} = 2A_2 + 2E, \Gamma_{13} = A_1 + 2A_2 + 3E$

В

	C_{2h}	E	C_2	i	σ_h
Γ_{10}		8	0	6	2
Γ_{11}		3	1	-3	-1

Ответ: $\Gamma_{10} = 4A_g + 3B_g + B_u, \Gamma_{11} = 2A_u + B_u$

Тема 4. Применение матриц

Цели

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Уметь

- Объединить две матрицы
- Составить матрицу для описания заданного преобразования
- Найти характер матрицы, представляющей операцию симметрии, в любом заданном базисе

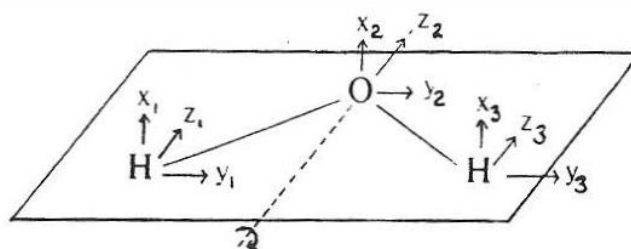
1. Запишите следующее преобразование в матричной форме и найдите характер матрицы:

$$x = \frac{\sqrt{3}x}{2} + \frac{-1y}{2}$$

$$y = \frac{1x}{2} + \frac{\sqrt{3}y}{2}$$

Ответ: $\sqrt{3}$

2. При рассмотрении молекулярных колебаний необходимо найти представление с использованием направлений x , y , z для каждого атома в качестве базиса. Для молекулы воды этот базис выглядит следующим образом:



Если мы повернём на пол-оборота вокруг z , то новая x_1 равняется $-x_3$, новая y_1 равна $-y_3$, новая z_1 равна z_3 и т.д.

Такой поворот можно представить матрицей M 9×9 , которая содержит все эти преобразования:

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

$$M \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \\ x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x_3 \\ -y_3 \\ -z_3 \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \\ \dots \end{pmatrix}$$

Каков характер матрицы M? Ответ должен включать полную матрицу этого преобразования.

Ответ: $\chi = -1$. Полное уравнение:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \\ z_1 \\ x_2 \\ y_2 \\ z_2 \\ x_3 \\ y_3 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -x_3 \\ -y_3 \\ +z_3 \\ -x_2 \\ -y_2 \\ +z_2 \\ -x_1 \\ -y_1 \\ +z_1 \end{pmatrix}$$

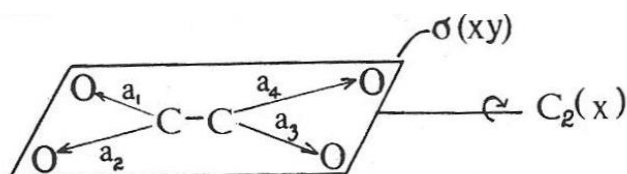
Тема 5. Вырожденные представления

Цель

- По завершении этой темы студенты должны научиться находить характеры набора представлений, даваемых использованием набора вырожденных векторов как базиса.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

1. Используйте связи, показанные стрелочками, в качестве базиса для составления матриц, представляющих операции i , $\sigma(xy)$ и $C_2(x)$ для иона оксалата. Найдите характер каждой из матриц.



Ответы: $\chi(i) = 0$, $\chi(\sigma_{(xy)}) = 4$, $\chi(C_{2(x)}) = 0$.

2. В группе C_{4v} таблица характеров вращений около x и около y (xy, xz, yz) принадлежат к представлению E . Они, однако, не все смешиваются при операциях симметрии. В таблице характеров, таким образом, они объединяются скобочками в соответствии со способом смешивания:

C_{4v}	E	$2C_4$	C_2	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	
E	2	0	-2	0	0	$(xy) (R_x, R_y) (xz, yz)$

Отсюда видно, что xz и yz являются вырожденными по отношению друг к другу в этой симметрии, но не с x или y , которые являются тем не менее по отношению друг к другу вырожденными. Видно, что x принадлежит к представлению B_u группы C_{2h} .

Какому представлению принадлежит y ?

Ответ: B_u , т.к. $Ey = y$, $C_2y = -y$, $iy = -y$, $\sigma(xy)y = y$.

Тема 6. Применение к химическим связям

Цели

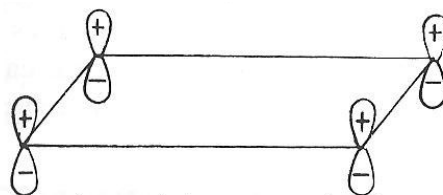
Научиться

- Находить наборы гибридных орбиталей, с заданными направленностями

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

- Определять наиболее удобные для π -связей орбитали в молекуле
- Определять симметрию молекулярных орбиталей ЛКАО
- Составлять простые корреляционные диаграммы МО

Какова группа симметрии этой молекулы?



Ответ:

D_{4h} . Операции этой группы:

$$E \quad 2C_4 \quad C_2=C_4^2 \quad 2C_2' \quad i \quad 2S_4 \quad \sigma_h \quad 2\sigma_v \quad 2\sigma_d.$$

Запишите приводимое представление для D_{4h} образованное с использованием атомных p-орбиталей в качестве базиса.

Ответ:

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_5	4	0	0	-2	0	0	0	-4	2	0

С помощью таблицы характеров разложите это представление на НП.

Ответ: $\Gamma_5 = E_g + A_{2u} + B_{2u}$, т.е. имеется две невырожденных орбитали и одна вырожденная пара. Это согласуется с простыми расчетами, которые показывают, что энергии должны быть $(\alpha + 2\beta)$, α (дважды), $(\alpha - 2\beta)$. Орбитали E_g очевидно имеют энергию α , а две другие однократно вырожденные.

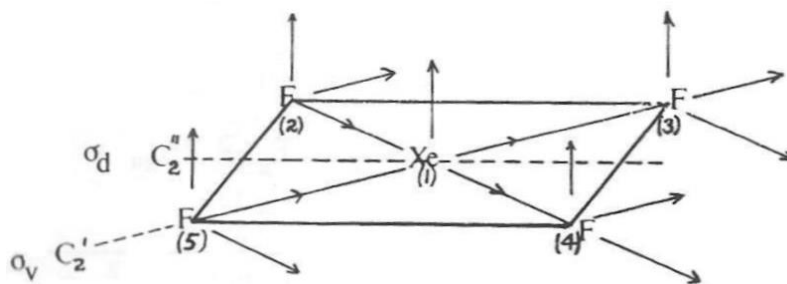
Тема 7. Применение к молекулярным колебаниям

Цели

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

- Уметь находить признаки симметрии нормальных колебаний для молекулы с заданной симметрией
- Находить число активных колебаний в ИК и в КР
- Находить число активных колебаний в характеристическом диапазоне ИК и КР спектра молекулы

Найдите типы симметрии всех колебаний для молекулы XeF_4 . Молекула принадлежит к группе D_{4h} . Найдите приводимые представления для 15 векторов вдоль осей x , y и z .



D_{4h} :

$E \quad 2C_4 \quad C_2=C_4^2 \quad 2C_2' \quad i \quad 2S_4 \quad \sigma_h \quad 2\sigma_v \quad 2\sigma_d$.

D_{4h}	E	$2C_4$	C_2	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ_2	15	1	-1	-3	-1	-3	-1	5	3	1

Разложите это ПП на НП, пользуясь таблицей характеров неприводимых представлений.

Ответ: $\Gamma_2 = A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + E_g + 2A_{2u} + B_{2u} + 3E_u$.

Каково полное вырождение Γ_2 , учитывая, что A и B одномерные представления, а E – двумерное.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Ответ: 15. Наше представление 15-кратно вырожденное 3×5 для 5 атомной молекулы, и надо вычесть три трансляционных и три вращательных степеней, получая $3n-6$ колебательных степени свободы.

Какова симметрия трансляций?

Ответ: $A_{2u} + E_u$

Какова симметрия вращений?

Ответ: $A_{2g} + E_g$

Вычтем трансляции и вращения из полного представления, и получим колебательное представление:

$$\begin{aligned} \Gamma_2 &= A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + E_g + 2A_{2u} + B_{2u} + 3E_u - \\ &\quad - A_{2u} + E_u - \\ &\quad - A_{2g} + E_g = \\ &= A_{1g} + B_{1g} + B_{2g} + A_{2u} + B_{2u} + 2E_u \end{aligned}$$

Полное вырождение для колебаний = 9 (=3n - 6).

Применяя правила для определения активности колебаний по симметрии, определите, какие колебания будут активными в ИК для этой молекулы?

Ответ: A_{2u} и $2E_u$.

Применяя правила для определения активности колебаний по симметрии, определите, какие колебания будут активными в КР для этой молекулы?

A_{1g} , B_{1g} и B_{2g} .

Эти результаты показывают, что выполняется правило альтернативного запрета, т.е. активные в ИК колебания, не проявляются в КР, и наоборот, колебания, активные в КР, не активны в ИК.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего профессионального образования
 «Дальневосточный федеральный университет»
 (ДФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

МАТЕРИАЛЫ ДЛЯ ОРГАНИЗАЦИИ САМОСТОЯТЕЛЬНОЙ РАБОТЫ СТУДЕНТОВ
 по дисциплине

«СИММЕТРИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ»

Направление подготовки – 03.03.02 Физика

Экспериментальная физика

Форма подготовки очная

г. Владивосток
2019

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Самостоятельная работа включает:

- предварительную подготовку к аудиторным занятиям (изучение учебной программы, установление связи с ранее полученными знаниями);
- осмысление учебной информации во время лекций, ее обобщение и краткая запись, при необходимости – доработка конспектов лекций;
- изучение и анализ рекомендованных источников;
- выяснение сложных, непонятных вопросов и их уточнение во время консультаций (организуются как традиционные, так и on-line консультации);
- подготовка к промежуточному и итоговому тестированию;
- выполнение индивидуальных учебных заданий, предусмотренных программой.

Календарный план практических занятий с указанием максимального количества баллов, потенциально доступных студенту

№	Дата	Название темы	Форма контроля	Максимальное количество баллов
1	1 – 5 недели	Симметрия и понятие группы	Решение домашних задач, самостоятельная работа на занятии (промежуточное тестирование)	30
2	6 - 10 недели	Элементы теории представлений	Решение домашних задач, самостоятельная работа на занятии (промежуточное тестирование)	30
3	11 – 17 недели	Применения теории групп и представлений	Решение домашних задач, самостоятельная работа на занятии (промежуточное тестирование)	30
4	18 неделя	Итоговое занятие	Индивидуальное домашнее задание для тестирования по модулю 3	10

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Методические рекомендации к самостоятельной работе по освоению дисциплины «Симметрия физических систем»

Весь курс разделён на три модуля, в каждый из модулей входит несколько разделов (тем). Модуль начинается со списка изучаемых понятий, а также целей, которые в результате должны быть достигнуты. Перечисляются необходимые предварительные знания и умения. Приступая к каждому разделу, на первой стадии, возможно, будет полезно вначале прочитать выводы по теме. Тест, предлагаемый в завершение раздела, даёт также представление о типах задач, с которыми нужно будет научиться справляться. На этом этапе не заглядывайте в ответы.

Рекомендуется не читать сразу разобранные примеры решений, а попробовать выполнить задание самостоятельно, опираясь на знания, полученные в аудитории. Обязательно записывайте ход решения и полученный результат, это очень важно: такая активность закрепляет Ваш успех. После этого посмотрите образец решения.

Продвигаясь по курсу таким образом, с опорой на электронный вариант в Вб, Вы можете выбрать свой темп работы, каждый раз самостоятельно тестируя степень усвоения данной темы. Если ответы на все вопросы тестов для самопроверки правильные, можно переходить к следующему разделу. При несовпадении ответов попытайтесь определить, как был получен данный результат, найти источник ошибки, для этого вернитесь к соответствующему материалу, посмотрите основные определения, сведения из теории, контрольные вопросы, примеры задач, их решения, и проделайте тест снова. Когда набраны целевые баллы за тест, можно продвигаться к изучению следующего раздела.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

В конце каждого модуля даются задания промежуточного тестирования, результаты которых учитываются в рейтинговой оценке.

Модуль 1. Симметрия и понятие группы

Тема 1. Элементы и операции симметрии

Молекулярный конструктор на этом этапе может помочь представить геометрию молекулы, найти элементы симметрии, моделировать действие операций симметрии. Молекулярные конструкторы можно поискать в отделах развивающих игр детских магазинов или заказать через Интернет:

1. <http://www.inteltoys.ru/catalog/153/prod1356.html>
2. <http://www.igrushka-prazdnik.ru/product/molekuljarnyj-konstruktor/>
3. <http://www.vodniruki.ru/category/bytovaya-tehnika/racii/item/molekulyarnaya-model-atoma-dlya-izucheniya-organicheskoy-himii-8488/1969/14858.html?pid%5B%5D=1914&pid%5B%5D=1967>

Некоторые пользуются пластилином и спичками (или зубочистками), чтобы сделать объёмные модели молекул.

Тема 2. Точечные группы

Научиться определять группу симметрии молекулы необходимо для многих целей (примеры некоторых применений будут рассмотрены в третьем модуле). Вы находите все элементы симметрии и связанные с ними операции симметрии, затем, пользуясь схемой, устанавливаете принадлежность к определённой группе (один из вариантов схемы приведен на рис.1). В литературе и Интернете можно подобрать и распечатать один из вариантов такой схемы, удобной именно

для Вас. На практике часто группу симметрии устанавливают интуитивно путём сравнения с объектами, чья группа симметрии известна, а в случае сомнений обращаются к схеме.

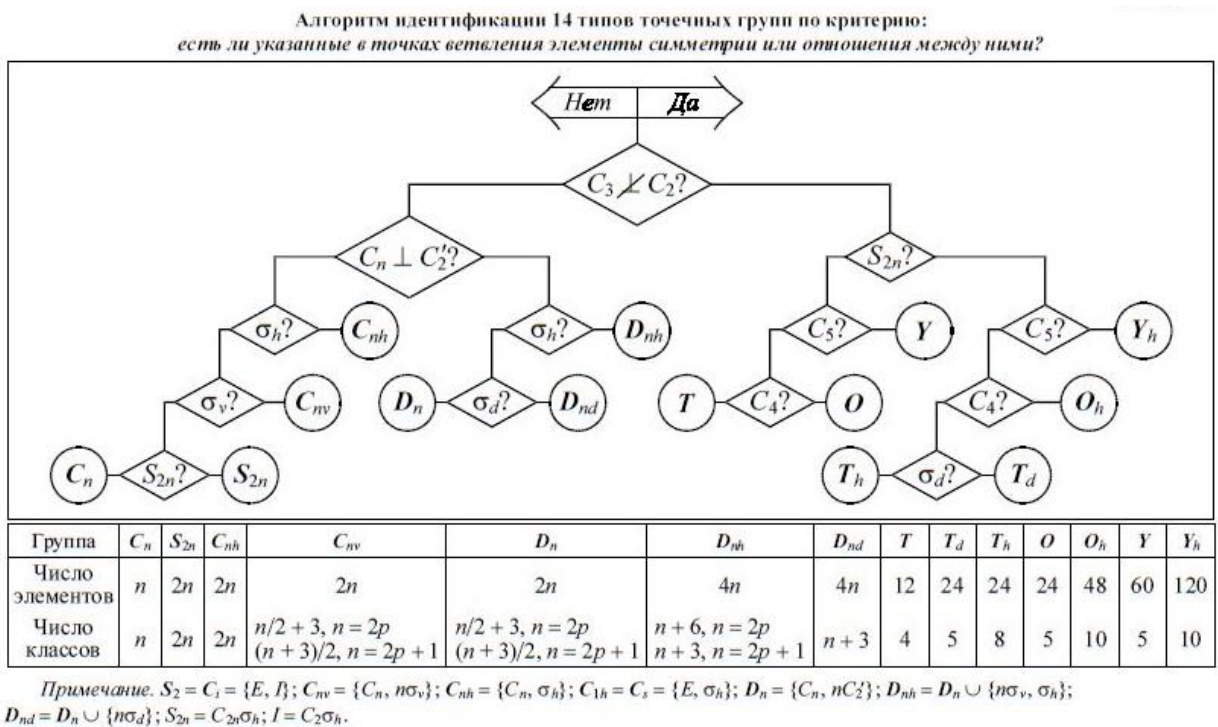


Рисунок 1. Алгоритм идентификации точечных групп.

Модуль 2. Элементы теории представлений

Тема 3. Невырожденные представления

Теперь можно перейти к количественному описанию операций симметрии с помощью чисел (представлений). Данный раздел затрагивает только представления, включающие +1 и -1 (подразумевающие простейшие вычисления). Обратите внимание на термины: что понимают под симметричными, антисимметричными, полносимметричными представлениями.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Указанные числа описывают действие операций данной группы на определённые пространственные характеристики (например, координаты или векторы связей). Эти представления перемножаются точно таким же образом, что и операции группы. Здесь же вводятся понятия приводимых (ПП) и неприводимых представлений (НП).

Для того, чтобы раскладывать приводимые представления на неприводимые, Вам достаточно воспользоваться формулой:

$$a = \frac{1}{h} \sum \chi_R \times \chi_I \times N, \quad \text{где}$$

a – показывает, сколько раз неприводимое представление содержится в приводимом;

h – порядок группы (= число операций в группе);

χ_R – характер приводимого представления;

χ_I – характер неприводимого представления;

N – число операций симметрии в классе.

Суммирование производится по классам.

Пример.

Приводимое представление Γ с характерами χ_R в группе C_{2v} , заданное таблицей 1, показано в нижней строке, примыкающей к таблице неприводимых представлений этой группы:

Таблица 1. Характеры НП для группы C_{2v} и некоторого ПП Γ .

C_{2v}	E	C_2	$\sigma(xz)$	$\sigma'(yz)$
A_1	1	1	1	1
A_2	1	1	-1	-1
B_1	1	-1	1	-1
B_2	1	-1	-1	1
Γ	3	3	1	1

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Здесь $h = 4$, для операции $E \chi_R = 3$, для операции $C_2 \chi_R = 3$, и для отражения в плоскостях σ оба характера $\chi_R = 1$.

Вычисляем по формуле число a , показывающее, сколько раз представление A_1 содержится в данном приводимом представлении Γ :

$$a = \frac{1}{4} [(3 \times 1 \times 1) + (3 \times 1 \times 1) + (1 \times 1 \times 1) + (1 \times 1 \times 1)] = 2$$

$\begin{array}{cccc} \chi_R & \chi_I & N & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \\ \underbrace{(3 \times 1 \times 1)}_E & \underbrace{(3 \times 1 \times 1)}_{C_2} & \underbrace{(1 \times 1 \times 1)}_{\sigma(xz)} & \underbrace{(1 \times 1 \times 1)}_{\sigma(yz)} \end{array}$

\uparrow
 h

Такое же вычисление для представления A_2 даёт:

$$a = \frac{1}{4} [(3 \times 1 \times 1) + (3 \times 1 \times 1) + (1 \times (-1) \times 1) + (1 \times (-1) \times 1)] = 1$$

$\begin{array}{cccc} \chi_R & \chi_I & N & \\ \downarrow & \downarrow & \downarrow & \\ \underbrace{(3 \times 1 \times 1)}_E & \underbrace{(3 \times 1 \times 1)}_{C_2} & \underbrace{(1 \times (-1) \times 1)}_{\sigma(xz)} & \underbrace{(1 \times (-1) \times 1)}_{\sigma(yz)} \end{array}$

\uparrow
 h

Число a для B_1 :

$$a = \frac{1}{4} [(3 \times 1 \times 1) + (3 \times (-1) \times 1) + (1 \times 1 \times 1) + (1 \times (-1) \times 1)] = 0$$

Число a для B_2 :

$$a = \frac{1}{4} [(3 \times 1 \times 1) + (3 \times (-1) \times 1) + (1 \times (-1) \times 1) + (1 \times 1 \times 1)] = 0$$

Таким образом, разложение приводимого представления Γ на неприводимые даёт:

$$\Gamma = 2A_1 + A_2.$$

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Важность процедуры разложения Γ на Π в теории групп трудно переоценить. Вы должны научиться образовывать простейшие невырожденные представления для описания результатов действия операций симметрии, а также выполнять такие разложения. Можно не только выполнить все предлагаемые аудиторные и домашние задания, но и найти дополнительные упражнения в литературе.

Тема 4. Применение матриц

В этом разделе рассматривается применение теории матриц к нашим задачам: например, каким образом комбинация двух матриц описывает последовательное применение операций симметрии. Нужно вспомнить (или научиться), как составить матрицу, описывающую преобразование координат при разных операциях симметрии.

Характер квадратной матрицы – это сумма элементов её главной диагонали. Для матрицы, представляющей операцию, характер определяется коэффициентами, с которыми базисные векторы преобразуются сами в себя при этой операции (могут быть отрицательными, если направления векторов меняются на противоположные).

Тема 5. Вырожденные представления

Этот раздел, скорее, связывает воедино содержание предыдущих тем.

Нужно хорошо понимать, почему мы используем понятие «таблица характеров». В простых невырожденных представлениях матриц в ячейках таблицы были просто числа, и характер соответствующей матрицы тоже был числом. Операции объединяются в классы, т.к. характеры всех операций одного класса одинаковые.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Теперь задача состоит в том, чтобы находить набор представлений, производимых использованием вырожденных векторов в качестве базиса.

Если группа содержит ось порядка 3 или выше, то применение операций симметрии приводит к преобразованию одного направленного свойства в другое. Если с этими свойствами связана энергия, например, энергия p_x и p_y орбиталей, эти энергии должны быть одинаковыми, т.е. симметрия говорит нам прямо, что свойства, связанные с направлениями, которые перемешиваются из-за симметрии, должны быть вырожденными.

Если два направленно зависимых свойства смешиваются при операциях симметрии, то такая операция может быть описана матрицей, чей характер приводится в таблице характеров. Такое смешивание направленно зависимых операций приводятся в скобках в таблице характеров, например, (x,y) ; (xz,yz) и т.д.

Модуль 3. Применение теории групп и представлений

Тема 6. Применение к химическим связям

В большинстве случаев применение теории групп сводится к трём правилам:

- используйте подходящий базис для составления приводимого представления точечной группы;
- разложите ПП на НП;
- интерпретируйте результат.

Если какие-то из этих слов непонятны, вернитесь к предыдущим темам:

- базис – тема 4,
- приводимое представление – тема 3;
- точечная группа – тема 2;
- разложение – тема 3;

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

– неприводимое представление – темы 3 и 5.

Рассмотрим пример. Вначале конструируется набор гибридных орбиталей. Здесь мы будем использовать тригональную плоскую фигуру и найдём вначале, какие орбитали могут гибридизироваться, давая три тригональных σ -связи в плоскости.

1. Определяем группу симметрии: это D_{3h} . Такой симметрией обладает, к примеру, молекула BCl_3 .

2. Набор векторов будет следующим:

Его можем использовать как базис для составления приводимого представления точечной группы D_{3h} .

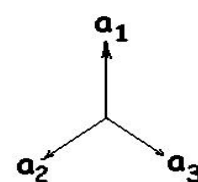


Рисунок 2. 1-й базис для σ -связей.

Перечислим операции этой группы:

E $2C_3$ $3C_2$ σ_h $2S_3$ $3\sigma_v$.

3. Простейший способ найти характер матрицы, представляющей данную операцию, в этом случае – это число векторов, не меняющихся при данной операции. Используем это упрощение и запишем характеры представлений для E , C_3 и C_2 . Запишем характеры и полные матрицы преобразований.

$$E, \chi = 3 \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix}$$

$$C_3 \text{ (по часовой стрелке)}, \chi = 0 \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_2 \\ a_3 \\ a_1 \end{pmatrix}$$

$$C_2 \text{ (через } a_1), \chi = 1 \quad \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_3 \\ a_2 \end{pmatrix}$$

4. Найдём теперь характеры представлений других операций:

σ_h , $\chi = 3$ все векторы неизменны;

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

S_3 , $\chi = 0$ все векторы изменяются

σ_v , $\chi = 1$ плоскость проходит через одну стрелочку и оставляет её неизменной.

Окончательный набор характеров приводимых представлений:

Таблица 2. Характеры приводимых представлений для 1-го базиса.

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ_1	3	0	1	3	0	1

Используем таблицу характеров неприводимых представлений для разложения этого ПП на НП.

Для данного базиса приводимое представление Γ_1 раскладывается следующим образом:

$$a^{A'_1} = \frac{1}{12} (3 + 0 + 3 + 3 + 0 + 3) = 1$$

$$a^{A'_2} = \frac{1}{12} (3 + 0 - 3 + 3 + 0 - 3) = 0$$

$$a^{E'} = \frac{1}{12} (6 + 0 + 0 + 6 + 0 + 0) = 1$$

и т.д. Если у Вас не получились эти числа, то стоит вернуться к модулю 2.

$$\Gamma_1 = A'_1 + E'$$

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

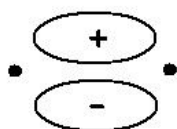
Таблица 3. Характеристики неприводимых представлений группы D_{3h} .

D_{3h}	E	$2C_3(z)$	$3C'_2$	$\sigma_h(xy)$	$2S_3$	$3\sigma_v$	линейные функции, вращения	квадратичные функции
A'_1	+1	+1	+1	+1	+1	+1	-	x^2+y^2, z^2
A'_2	+1	+1	-1	+1	+1	-1	R_z	-
E'	+2	-1	0	+2	-1	0	(x, y)	(x^2-y^2, xy)
A''_1	+1	+1	+1	-1	-1	-1	-	-
A''_2	+1	+1	-1	-1	-1	+1	z	-
E''	+2	-1	0	-2	+1	0	(R_x, R_y)	(xz, yz)

Глядя на два правых столбца таблицы 3, можно установить, какие орбитали относятся к типам симметрии A'_1 и E' . A'_1 включает или d_z^2 , или сферическую s-орбиталь. E' включает p_x совместно с p_y , либо $d_{x^2-y^2}$ совместно с d_{xy} (они заключены в общие скобки дважды вырожденного представления).

Для элемента первого периода периодической системы (В) имеются только s, p_x , p_y , т.е. набор sp^2 . Плоскость молекулы xy , z – вертикальная ось.

Рассмотрим теперь какие орбитали удобны для описания π -связей в молекуле группы D_{3h} . Вспомним, что волновая функция π -связи состоит из двух половин, различающихся знаками:



Изобразим стрелочкой симметрию этой орбитали: $\bullet \uparrow \bullet$. Имеем в виду, что каждая пара атомов связывается π -связью под прямыми углами, поэтому в качестве базиса для представления возможных π -связей молекулы типа AB_3 резонно выбрать шесть стрелочек:

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

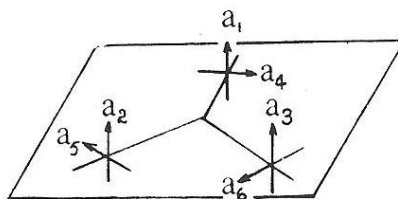


Рисунок 3. Базисы для π -связей.

Получилось два набора: a_1, a_2, a_3 (вне плоскости) и a_4, a_5, a_6 – в плоскости. Очевидно, что эти два набора не будут смешиваться ни при каких операциях симметрии, поэтому их можно рассматривать по отдельности.

Рассмотрим, как преобразуются a_1, a_2 и a_3 при действии операций группы (помним, что положительное направление – вверх). Запишем характеры представления для «внеплоскостного» набора:

Таблица 4. Характеры ПП для второго базиса.

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ_2	3	0	-1	-3	0	1

То же - для «плоскостного» набора:

Таблица 5. Характеры ПП для третьего базиса.

D_{3h}	E	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_v$
Γ_3	3	0	-1	3	0	-1

Разложение на неприводимые представления даёт:

$$\Gamma_2 = A_2'' + E''$$

$$\Gamma_3 = A_2' + E'$$

Опять посмотрите в таблицу 3 характеров НП, чтобы определить орбитали, обладающие такими свойствами симметрии.

Вне плоскости: p_z и совместные (d_{xz}, d_{yz}).

В плоскости: совместные (p_x, p_y) или ($d_{x^2-y^2}, d_{xy}$)

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Орбиталь симметрии A'_2 отсутствует. Для бора нет энергетически доступных d-орбиталей. Орбитали p_x и p_y в молекуле данного типа участвуют в образовании σ -связей, так что остаётся только одна орбиталь, отвечающая π -связи: p_z -орбиталь:

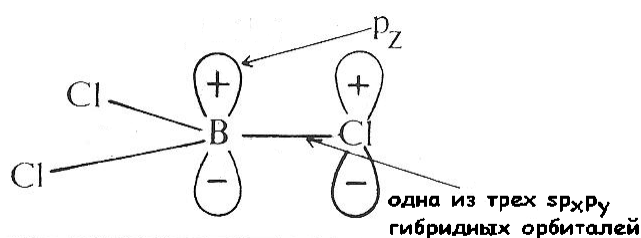


Рисунок 4. Одна из π -орбиталей молекулы BCl_3 .

С помощью свойств симметрии орбиталей можно устанавливать соответствие между атомными и молекулярными орбиталями: рис. 2.

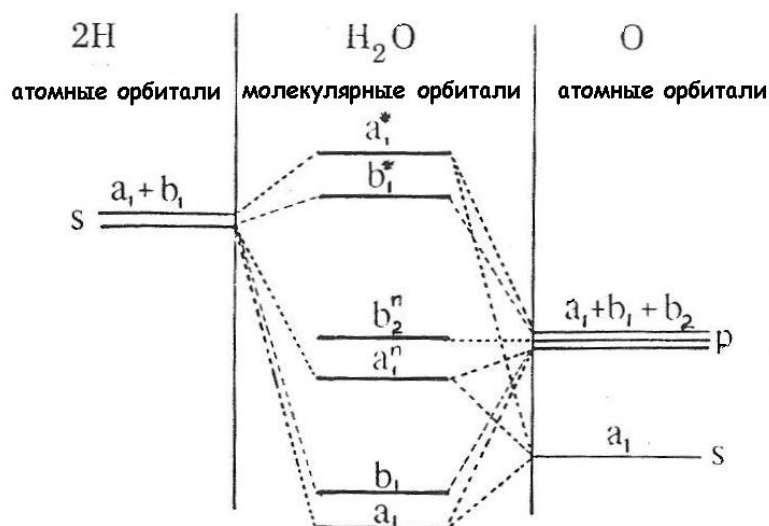


Рисунок 5. Корреляционная диаграмма для молекулы воды, составленная с помощью аппарата теории групп.

Тема 7. Применение к молекулярным колебаниям

Освоив этот раздел, Вы научитесь определять симметрию колебаний молекулы и выделять колебания, активные в ИК и в КР. Если Вы не уверены во

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

владении материалом первых двух модулей, вернитесь к соответствующим разделам.

Каждое движение атома в молекуле можно разложить на три компоненты вдоль осей x , y и z . Если в молекуле n атомов, то возможно $3n$ смещений её атомов. Из них 3 приходится на перемещение молекулы как целого, 3 – на вращение (для нелинейной молекулы), таким образом, на колебательное движение приходится $3n-6$ степеней свободы (для линейной молекулы $3n-5$).

Рассмотрим плоскую молекулу XeF_4 . Она относится к группе симметрии D_{4h} (рис. 6):

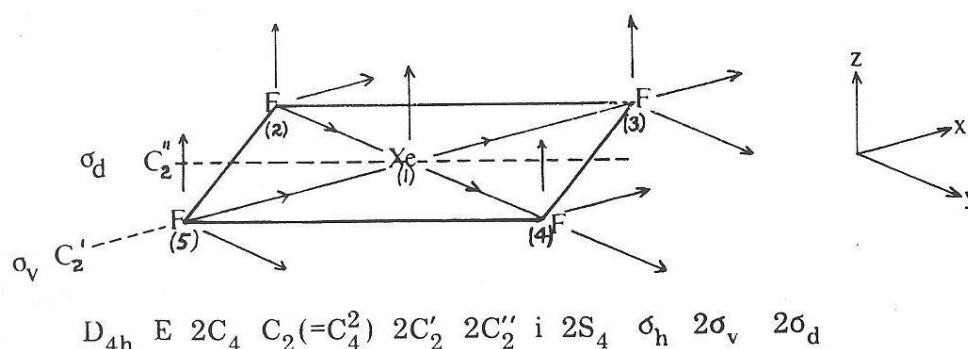


Рисунок 6. Молекула XeF_4 и её операции симметрии.

Базисный набор состоит из 15 векторов, показанных на рисунке стрелочками.

Характеры приводимого представления определяются в следующем виде:

Таблица 6. Характеры ПП для молекулы XeF_4 (группа D_{4h}).

D_{4h}	E	$2C_4$	$C_2(=C_4^2)$	$2C_2'$	$2C_2''$	i	$2S_4$	σ_h	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
Γ	15	1	-1	-3	-1	-3	-1	5	3	1

Разложим его на неприводимые представления:

$$\Gamma = A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + E_g + 2A_{2u} + B_{2u} + 3E_u.$$

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Общая степень вырождения этого представления равна 15 (3×5 для пятиатомной молекулы), Однако сюда входят три трансляционных и три вращательных степени свободы, так что остаётся всего 9 колебательных мод.

Трансляционное представление: $A_{2u} + E_u$ (однократно вырожденное перемещение вдоль оси z) и две эквивалентных трансляции вдоль x и y, которые вместе дают дважды вырожденное представление E_u . Вращательное представление: $A_{2g} + E_g$.

Вычтем трансляционное и вращательное представления и получим колебательное приводимое представление:

$$\Gamma = A_{1g} + A_{2g} + B_{1g} + B_{2g} + E_g + 2A_{2u} + B_{2u} + 3E_u -$$

$$- A_{2g} \quad - E_g =$$

$$\Gamma_v = A_{1g} + B_{1g} + B_{2g} + A_{2u} + B_{2u} + 2E_u.$$

Полная кратность вырождения равна 9.

Теперь можно приступить к определению колебаний, активных в ИК и КР по правилам:

- ✓ колебание будет активным в ИК, если оно принадлежит к той же симметрии, что и компонента дипольного момента, т.е. преобразуется при операциях симметрии как координата x, y или z.
- ✓ колебание будет активным в КР, если оно принадлежит к той же симметрии, что и компонента поляризуемости, т.е. преобразуется при операциях симметрии как одно из бинарных произведений: $x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz$, либо комбинация произведений, как $x^2 - y^2$.

Применение этих правил даёт для молекулы XeF_4 следующее:

В ИК поглощении являются активными колебания типов A_{2u} и $2E_u$

В комбинационном рассеянии активны : A_{1g}, B_{1g}, B_{2g} .

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Всего три полосы в поглощении и три линии в комбинационном рассеянии. Ни одно из этих колебаний не проявляется и в том, и в другом спектре что находится в согласии с правилом альтернативного запрета для молекул, обладающих центром инверсии.

Задания для самостоятельного выполнения аналогичны содержащимся в разделах «Материалы для практических занятий» и «Контрольно-измерительные материалы» настоящего РПУД.

Примеры решения задач и выполнения заданий содержатся в разделе «Материалы для практических занятий».

С помощью технологий обучения, основанных на применении компьютеров, мультимедиа систем, аудиовизуальных материалов и т.д. (размещённых на странице курса в Blackboard), студенты активизируют самостоятельную работу. Облегчается контроль ее выполнения. При желании с помощью этого средства они имеют возможность организовать свои самостоятельные занятия асинхронно с аудиторными.

В ходе самостоятельных занятий студентами также могут быть использованы методические рекомендации общего плана, например, Уваровская О.В. Краева И.Ю. Самостоятельная работа студентов. Учебно-методическое пособие. – Сыктывкар. : Изд-во СыктГУ, 2009. 30с.
www.syktu.ru/.../Metodicheskie-rekomendacii-po-samost-rabote-uchash

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего профессионального образования
 «Дальневосточный федеральный университет»
 (ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

КОНТРОЛЬНО-ИЗМЕРИТЕЛЬНЫЕ МАТЕРИАЛЫ

по дисциплине

«СИММЕТРИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ»

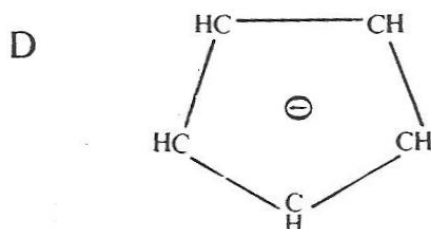
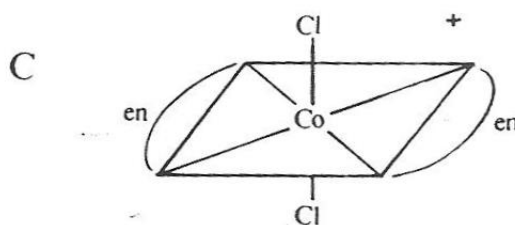
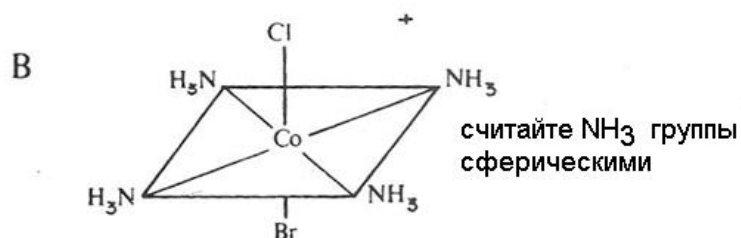
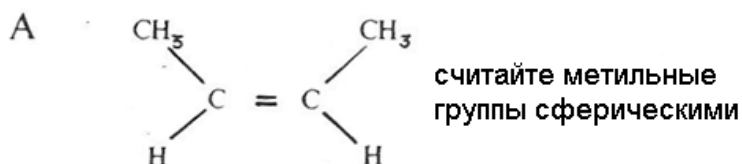
<Шифр 011200.62> - «<Название образовательной программы/ специальности физика/теоретическая физика>>

г. Владивосток
2018

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Образец задания для текущего тестирования

1. Выпишите все элементы симметрии следующих молекул



2. Изобразите схематически следующие элементы симметрии:

- a) вертикальную зеркальную плоскость и ось C_2 для молекулы озона (O_3);
- b) горизонтальную зеркальную плоскость в молекуле CO_2 ;
- c) ось S_4 метана;

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

- d) все элементы симметрии молекулы CH_3F (точечная группа C_{3v});
- e) все элементы симметрии молекулы этилена (точечная группа D_{2h})
3. Определите элементы симметрии, которыми обладают s-орбиталь, p-орбиталь, а d_z^2 орбиталь, и d_{xy} орбиталь
4. Какие из следующих молекул имеют: 1) центр инверсии; 2) ось S_4 ?
- CO_2
 - C_2H_2
 - BF_3
 - SO_4^{2-}
5. Найдите элементы симметрии для следующих молекул, и, пользуясь таблицей из лекций, отнесите каждую молекулу к точечной группе:
- NH_2Cl
 - SiF_4
 - $\text{H-C}\equiv\text{N}$
 - SiFClBrI
 - NO_2
 - H_2O_2
6. Какие элементы симметрии не позволяют молекуле быть полярной? Какие из молекул предыдущего вопроса являются полярными?
7. Какие элементы симметрии не допускают хиральности молекулы? Какие из молекул (если таковые есть) из списка к вопросу 4 могут быть хиральными?

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

8. Какие операции симметрии присущи точечной группе C_{2v} ? Приведите пример молекулы, принадлежащей к этой точечной группе.
9. Проведите операции последовательного умножения разных операций симметрии, составьте таблицу умножения для этой группы.
10. Как можно использовать теорию групп, чтобы определить, будет ли интеграл отличен от нуля?
11. Используя теорию групп, определите, являются ли следующие интегралы ненулевыми (с помощью таблиц прямых произведений, данных на лекциях).
- интеграл перекрывания орбиталей p_x и p_z в точечной группе C_{2v}
 - интеграл перекрывания орбиталей p_x и d_{xz} в точечной группе C_{3v}
 - интеграл перекрывания орбиталей p_y и d_z^2 в точечной группе T_d
 - интеграл перекрывания орбиталей p_z и d_z^2 в точечной группе D_{2h}
12. Какие из следующих электронных переходов разрешены по симметрии?
- переход из состояния симметрии A_1 в состояние симметрии E_1 , возбуждённый светом, поляризованным по z в молекуле, принадлежащей к точечной группе C_{5v} .
 - переход из состояния симметрии A_1 в состояние симметрии A_{2u} , возбуждённый светом, поляризованным по z в молекуле, принадлежащей к точечной группе $D_{\infty h}$;
 - переход из состояния симметрии B_2 в состояние симметрии B_1 , возбуждённый светом, поляризованным по y в молекуле, принадлежащей к точечной группе C_{2v} .

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

ЭЛЕКТРОННОЕ ТЕСТИРОВАНИЕ

Электронные тесты для промежуточного и итогового тестирования размещены на сайте Blackboard ДВФУ.

Примеры вопросов электронного теста

1. Число элементов в разных классах сопряженных элементов данной группы
 - может быть разным
 - может быть только одинаковым
 - всегда равно индексам инвариантных подгрупп данной группы
2. Данная подгруппа может быть образована
 - некоторыми элементами из разных классов сопряженных элементов
 - элементами разных классов смежности
 - она всегда является объединением нескольких классов сопряженных элементов
3. Число классов сопряженных элементов
 - всегда равно порядку группы
 - является делителем порядка группы
 - может быть равно порядку группы
4. В абелевой группе
 - только некоторые элементы коммутируют друг с другом
 - все элементы коммутируют друг с другом
 - число классов сопряженных элементов меньше порядка группы
5. Число различных неприводимых представлений группы
 - всегда равно числу ее классов сопряженных элементов

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

- может превышать порядок группы
 - равно числу всех инвариантных подгрупп группы
6. Размерность любого неприводимого представления
- может превышать порядок группы
 - является делителем порядка группы
 - совпадает с числом классов сопряженных элементов
7. В регулярное представление группы ее каждое неприводимое представление
- входит только один раз
 - может не входить вовсе
 - входит столько раз, какова размерность этого представления
8. Сумма квадратов модулей следов всех матриц неприводимого представления группы равна
- размерности данного представления
 - порядку группы
 - порядку ядра гомоморфизма данного представления
9. Представление T группы G есть прямое произведение двух представлений T_1 и T_2 этой же группы с размерностями n_1 и n_2 соответственно: Какова размерность представления T :
- n_1+n_2 ;
 - n_1*n_2 ;
 - n_1-n_2
10. Дано представление T абелевой группы порядка N в линейном пространстве размерности n . На какое число неприводимых представлений разлагается представление T :
- N ;

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

- n ;
- $n+N$?

11. Чему равен характер прямого произведения двух представлений группы

- совокупности сумм соответствующих компонент характеров этих представлений
- совокупности произведений соответствующих компонент характеров этих представлений
- скалярному произведению характеров двух вышеуказанных представлений

12. Какими правилами отбора определяется изменение орбитального квантового числа l для дипольных электрических переходов электрона в атоме:

- $\Delta l = \pm 2$;
- $\Delta l = \pm 1$;
- $\Delta l = 0$.

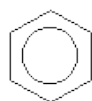
ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Примеры индивидуальных заданий типа «Назначение» для предоставления на проверку в электронном виде через страницу курса в Blackboard ДВФУ

Для указанных преподавателем молекул, например,



Нафталин



Бензол



Этан в шахматной конфигурации

1. Найдите все элементы симметрии, которыми обладает данная молекула.
2. Определите принадлежность молекулы к точечной группе симметрии.
3. Определите число колебательных степеней свободы.
4. Найдите в литературе и выпишите таблицу характеров неприводимых представлений для этой группы симметрии.
5. Произведите распределение нормальных колебаний по типам симметрии:
 - а) рассчитайте характеры приводимых представлений для всех операций симметрии для данной молекулы;
 - б) посчитайте, сколько раз каждое неприводимое представление данной группы содержится в полном колебательном (приводимом) представлении;
 - в) запишите результат в форме:

$$\Gamma^v = \dots + \dots + \dots + \dots$$

6. Рассчитайте характеры приводимых векторного и тензорного представлений данной группы.
7. Разложите оба эти приводимые представления на неприводимые.
8. Результат запишите в форме:

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

$$9. \Gamma^{\mu} = \dots + \dots + \dots + \dots$$

$$10. \Gamma^{\alpha} = \dots + \dots + \dots + \dots$$

11. Сделайте выводы об активности каждого из нормальных колебаний молекулы в спектрах ИК и КР.

Вопросы к экзамену

1. Определение группы, основные свойства групп.
2. Операции симметрии молекул.
3. Операции симметрии H_2O как точечная группа симметрии, её свойства.
4. Операции симметрии NH_3 , таблица умножения операций.
5. Свойства группы симметрии молекулы NH_3 .
6. Операции симметрии молекулы C_2H_2
7. Операции симметрии молекулы C_2H_6
8. Операции симметрии молекулы BF_3
9. Операции симметрии молекулы *транс*- CHFCHF .
10. Классы и подгруппы.
11. Матрицы преобразований системы декартовых координат.
12. Приводимые и неприводимые представления групп, базисы представлений.
13. Свойства представлений, обозначение неприводимых представлений.
14. Произведения представлений, симметричные и несимметричные произведения.
15. Разложения приводимых представлений на неприводимые.
16. Классификация точечных групп симметрии.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего профессионального образования
«Дальневосточный федеральный университет»
 (ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ И ИНТЕРНЕТ-ИСТОЧНИКОВ

по дисциплине «СИММЕТРИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ»

<Шифр 011200.62> - «<Название образовательной программы/ специальности физика/теоретическая физика>>

г. Владивосток
2018

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

ОСНОВНАЯ ЛИТЕРАТУРА

1. Иванов Е.Н. Симметрия физических систем и её применение в физике. Учебное пособие. - М: МИЭТ. - 2006. - 160 с.
<http://staff.ulsu.ru/moliver/ref/qc/ivan06.pdf>
2. Сенашов В.И. Основы теории групп. Версия 1.0 [Электронный ресурс]: сб. задач/ В.И.Сенашов, А.В. Тимофеенко, О.В.Пашковская. - Электрон. дан. (3 Кб). - Красноярск: ИПК СФУ, 2008.
http://ruthenia.info/txt/pavlo/179/senashov_2008.pdf

ДОПОЛНИТЕЛЬНАЯ ЛИТЕРАТУРА

3. Эллиот Дж., Добер П. Симметрия в физике. В 2- томах. Пер. с англ. М.: Мир. – 1983. –
4. Дмитриев И.С. Симметрия в мире молекул. М. - Химия. - 1976. - 126 с.
5. Vincent A. Molecular Symmetry and Symmetry of Physical Systems. A Programmed Introduction to Chemical Applications. John Wiley & Sons. - 1977. - 156 p.
6. Симкин Б.Я., Клецкий М.Е., Глуховцев М.Н. Задачи по теории строения молекул. Учебное пособие. Ростов-наДону: «Феникс». – 1977. – 272 с.

ИНТЕРНЕТ-ИСТОЧНИКИ

1. Сайт курса на платформе Blackboard ДВФУ. **идентификатор курса FU50702-011200.62-TG-01.**

Режим доступа – по паролю единой учётной записи университета.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

2. Внешние Интернет-источники приведены там же в форме гиперссылок в разделе «Дополнительные материалы».
3. Программа GAP: <http://www.gap-system.org/ukrgap/Gap-dist.htm>
4. Точечные группы симметрии:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/index.html>
5. Студенческий ресурс из книги “Physical Chemistry”, Atkins & de Paula:
<http://www.oup.com/uk/orc>
http://www.oup.com/uk/orc/bin/9780198700722/01student/tables/tables_for_groupphysics.pdf
6. Набор ссылок на другие ресурсы о симметрии:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/links.html>
7. Таблицы характеров <http://symmetry.jacobs-university.de/>
8. Там же - программа для on-line разложения приводимых представлений на неприводимые:
<http://symmetry.jacobs-university.de/cgi-bin/group.cgi?group=603&option=4>
9. Короткое видео о симметрии и группах: <http://youtu.be/ylAXYqgbp4M>
10. Видеолекция о свойствах групп (32 мин. англ. яз.)
<http://youtu.be/WwndchnEDS4>

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист



МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ И НАУКИ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
 Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
 высшего профессионального образования
 «Дальневосточный федеральный университет»
 (ДВФУ)

ШКОЛА ЕСТЕСТВЕННЫХ НАУК

ГЛОССАРИЙ

по дисциплине
 «СИММЕТРИЯ ФИЗИЧЕСКИХ СИСТЕМ»
 <03.03.02> - «физика/теоретическая физика»

г. Владивосток
 2018

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

АБЕЛЕВА ГРУППА	то же, что и коммутативная группа
ГРУППА	множество любых элементов, которые удовлетворяют следующим условиям: 1) каждой упорядоченной паре элементов a и b этого множества ставится в соответствие некоторый элемент c , также принадлежащий данному множеству (правило группового умножения), 2) групповое умножение ассоциативно, 3) существует единичный элемент, 4) существует обратный элемент для каждого элемента группы.
ГРУППОВЫЕ ОРБИТАЛИ	орбитали, преобразующиеся по какому-либо из неприводимых представлений группы симметрии.
ИЗОМОРФНЫЕ ГРУППЫ	две группы G и H называются изоморфными, если между элементами G_a группы G и элементами H_a группы H можно установить взаимно однозначное соответствие $G_a \leftrightarrow H_a$, такое, что из равенства $G_a \times G_b = G_c$ следует равенство $H_a \times H_b = H_c$.
КОММУТАТИВНАЯ ГРУППА	группа с коммутативной бинарной операцией $G_a \times G_b = G_b \times G_a$.
МАТРИЦА	совокупность чисел (вещественных или комплексных), записанных в виде таблицы.
НЕЙТРАЛЬНЫЙ ЭЛЕМЕНТ	элемент, задаваемый в определении группы, любое применение которого при бинарной операции оставляет другой элемент неизменным.
НЕПРИВОДИМОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ	такое представление группы, для которого не существует никакого алгебраического преобразования, способного привести к новым представлениям группы с матрицами, имеющими меньшую размерность.
ОПЕРАЦИЯ СИММЕТРИИ	такая операция, которая после её применения к какому-либо предмету приводит к новой его ориентации в пространстве, неотличимой от исходной и совмещаемой с ней.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

ПЕРЕСТАНОВОЧНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ	пара элементов a, b множества G такие, что $a \times b = b \times a$.
ПОДГРУППА	Подмножество H группы G , которое является группой относительно операции, определённой в G .
ПРЕДСТАВЛЕНИЕ ГРУППЫ	любое множество квадратных матриц, поставленных в соответствие элементам группы и подчиняющихся таблице умножения группы.
ПРИВОДИМОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ	такое представление группы, из которого можно путём алгебраического преобразования получить новые представления с матрицами меньшей размерности.
ПРЯМОЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕ	для групп G и H множество пар $G \times H$, наделённое операцией покомпонентного умножения $(g_1 h_1) \times (g_2 h_2) = (g_1 g_2) \times (h_1 h_2)$.
ТОЧЕЧНАЯ ГРУППА СИММЕТРИИ	набор всех операций симметрии, переводящих фигуру в новое положение, неотличимое от исходного, таким образом, что по крайней мере одна точка фигуры остаётся неподвижной в пространстве.

Интерактивный вариант глоссария содержится на сайте курса в Blackboard.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Справочные материалы, программы и статьи

1. Программа GAP: <http://www.gap-system.org/ukrgap/Gap-dist.htm>.
2. Точечные группы симметрии:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/index.html>.
3. Студенческий ресурс из книги “Physical Chemistry”, Atkins & de Paula:
<http://www.oup.com/uk/orc>.
http://www.oup.com/uk/orc/bin/9780198700722/01student/tables/tables_for_group_theory.pdf.
4. Набор ссылок на другие ресурсы о симметрии:
<http://www.staff.ncl.ac.uk/j.p.goss/symmetry/links.html>.
5. Таблицы характеров <http://symmetry.jacobs-university.de/> .
6. Там же - программа для *on-line* разложения приводимых представлений на неприводимые:
<http://symmetry.jacobs-university.de/cgi-bin/group.cgi?group=603&option=4> :

Reduction formula for point group D_{3h}

Type of representation

Γ_{general} Γ_{3N} Γ_{vib}

E	$2C_3(z)$	$3C_2'$	$\sigma_h(xy)$	$2S_3$	$3\sigma_v$
<input type="text" value="3"/>	<input type="text" value="-1"/>	<input type="text" value="2"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>	<input type="text" value="0"/>

7. Д.Б. Гелашвили, Е.В. Чупрунов, М.О. Марычев, Н.В. Сомов, А.И. Широков, А.А. Нижегородцев. Приложение теории групп к описанию псевдосимметрии биологических объектов. – Популярныe синопсисы. – Том 71. – 2010. – № 6. – Ноябрь-декабрь. – Стр. 497-513:
<http://elementy.ru/genbio/synopsis?discuss=326&return=1>.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ			
Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»			
Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист

Видео материалы на англ. яз.

8. Лекция (20 мин.) Marcus du Sautoy: Symmetry, reality's riddle
www.youtube.com/embed/415VX3QX4cU.
9. Лекция Ричарда Фейнмана (57 мин.) Richard Feynman - The Character of Physical Law - Part4 Symmetry in Physical Law (full version):
www.youtube.com/embed/zQ6o1cDxV7.
10. Лекция «Симметрия в физике» (52 мин.) - Dr. Christopher T. Hill - Symmetry in Physics: www.youtube.com/embed/7jkO81wEokg.
11. Симметрия в математике и музыке (8 мин.) - Music + Math: Symmetry
www.youtube.com/embed/V5tUM5aLHPA.

ДАЛЬНЕВОСТОЧНЫЙ ФЕДЕРАЛЬНЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Учебно-методический комплекс дисциплины «Симметрия физических систем»

Разработала: доц. В.И.Вовна	Идентификационный номер:	Контрольный экземпляр находится на кафедре теоретической и экспериментальной физики	Лист
--------------------------------	--------------------------	---	------