

**2.1** Nalezněte prvky symetrie následujících molekul: etan ( $C_2H_6$ ), eten ( $C_2H_4$ ), voda ( $H_2O$ ), kyselina chlorná ( $HClO$ ), oxid - tetrafluorid xenonový ( $XeOF_4$ ), amoniak ( $NH_3$ )

- $C_2H_6$  viz pdf poznámky k řešení

- $C_2H_4$

$D_{2h}$ : identita, tři dvojčetné osy, inverze, tři roviny zrcadlení

- $H_2O$

$C_{2v}$ : identita, dvojčetná osa, dvě vertikální roviny zrcadlení

- $HClO$

$C_s$ : identita, horizontální rovina zrcadlení

- $XeOF_4$

$C_{4v}$ : identita, čtyřčetná osa, dvojčetná osa, čtyři vertikální roviny symetrie

- $NH_3$

$C_{3v}$ : identita, trojčetná osa, tři vertikální roviny zrcadlení

**2.2** Zapište pomocí matic předpis pro následující základní prvky symetrie:  $C_4$ ,  $\sigma_y$ ; ilustруйте použití na příkladech. V maticové reprezentaci dokažte, že  $C_2 \cdot \sigma_z = i$ .

Matici určíme buď z geometrické představy (při  $C_4$  osa  $y$  přechází na  $-x$  a  $x$  na  $y$ ) anebo pomocí vztahů pro transformaci souřadnic — obecně pro  $C_n$  platí

$$C_n = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & \sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ -\sin\left(\frac{2\pi}{n}\right) & \cos\left(\frac{2\pi}{n}\right) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{a tedy} \quad C_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Při zrcadlení kolmo na osu  $y$  přechází  $y$  na  $-y$ , tj.

$$\sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

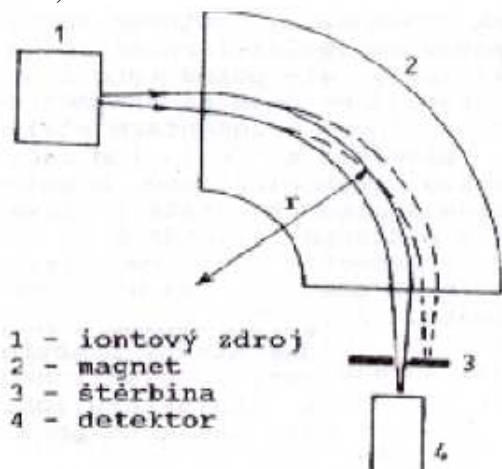
Stejně jako výše určíme  $C_2$  a  $\sigma_z$  a vynásobením dostaneme

$$C_2 \cdot \sigma_z = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

což je maticový předpis pro identitu.

**2.3** Nalezněte podmínku pro poměr  $m/q$  částic dopadajících na detektor. Uvažujte homogenní magnetické pole<sup>1</sup> indukce  $B$  a částice (ionty) urychlené ve zdroji akceleračním napětím  $V$ .

(hmotnostní spektrometr)



Na částici působí dostředivá a odstředivá síla, pro které platí  $F_d = Bqv$  (skalární zápis  $\vec{F}_d = q(\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B})$  pro naši geometrii) a  $F_o = \frac{mv^2}{r}$ , kde rychlost určíme z kinetické energie částice  $E_{\text{kin}} = \frac{mv^2}{2} = qU$ . Z požadované rovnosti sil dostáváme

$$\frac{m}{q} = \frac{B^2 r^2}{2U}$$

**2.4** Ukažte, že pětičetná osa symetrie není slučitelná s translační periodicitou mříže.

Vzhledem k povaze problému řešme v rovině kolmé na hledanou osu symetrie. Vyberme si řadu mřížových bodů vzdálených mezi sebou  $a$  (translační perioda). Uvažme v každém z těchto bodů obecnou  $n$ -četnou osu. Vyberme si dva sousední body,  $n$ -četné osy procházející těmito body opakují translace  $a$  po  $\alpha = \frac{2\pi}{n}$  stupních na obě strany. Má-li být takto vzniklá mříž symetrická vůči těmto osám, musí se 'pootočené' konce shodovat s mřížovými body, tj. jejich vzájemná vzdálenost musí být celým násobkem translační periody  $a$ .

Pro možné hodnoty úhlu  $\alpha$  tedy musí platit

$$ma = a + 2a \cos(\alpha),$$

kde  $m$  je celé číslo, hodnoty kterých může nabývat jsou omezeny cosinem na interval  $\langle -1, 3 \rangle$  a je tedy omezena i translační symetrií dovolená četnost rotační osy:

$m$	-1	0	1	2	3
$\alpha$	$\pi$	$\frac{2}{3}\pi$	$\frac{1}{2}\pi$	$\frac{1}{3}\pi$	$0(2\pi)$
$n$	2	3	4	6	1

tj. pětičetná osa se neshoduje s translační symetrií mříže.

<sup>1</sup>kolmé na rovinu nákresu