

OBSAH

1	ÚVOD	9
1.1	Symetrie a její význam v přírodních vědách. Historický přehled	9
2	ZÁKLADY ABSTRAKTNÍ A APLIKOVANÉ TEORIE GRUP	14
2.1	Prvky a operace symetrie	14
2.2	Stereografická projekce	18
2.3	Maticový zápis operací symetrie	21
2.4	Základní pojmy abstraktní teorie grup	24
2.4.1	Grupové postuláty	24
2.4.2	Multiplikační tabulka konečné grupy	26
2.4.3	Generátory grupy	27
2.4.4	Cyklické grupy	27
2.4.5	Třídy konjugovaných prvků grupy	27
2.4.6	Podgrupy	28
2.4.7	Faktorová grupa	29
2.4.8	Izomorfie a homomorfie grup	29
2.4.9	Direktní součin grup	30
2.4.10	Maticové reprezentace grup	30
2.4.11	Direktní součin ireducibilních reprezentací	33
2.4.12	Symetrizovaná a antisymetrizovaná reprezentace	34
2.4.13	Analýza reducibilní reprezentace	34
2.4.14	Souřadnice a vektory jako báze reprezentace	35
2.4.15	Některé důležité věty pro ireducibilní reprezentace konečných grup	35
2.4.16	Vnitřní struktura konečné abstraktní grupy	36
2.4.17	Doslov k abstraktní teorii grup	38
2.5	Symbolika ireducibilních reprezentací bodových grup	39
2.6	Teorémy o produktech operací symetrie	40
2.7	Bodové grupy symetrie — systematika a stereografická projekce	42
2.7.1	Osové bodové grupy	43
2.7.2	Stereografická projekce bodových grup	44
2.7.3	Rozdělení bodových grup	45
2.7.4	Rotační grupy	46
2.7.5	Kubické grupy	51
2.7.6	Ikosaedrické grupy	53
2.7.7	Sférické grupy	53
2.7.8	Pravidla o třídách symetrie v bodových grupách	53
2.8	Pravidelné mnohostěny	54
2.9	Určení bodové grupy	55

2.10	Korelace bodových grup	57
2.11	Krystalografické bodové grupy	61
2.12	Lauého grupy	63
2.13	Hierarchie krystalografických bodových grup	65
2.14	Minimální symetrie syngonií	70
2.15	Rodiny krystalografických bodových grup	71
2.15.1	Rodina bodové grupy \mathcal{T}	71
2.15.2	Rodina bodové grupy \mathcal{C}_3	72
2.15.3	Rodina bodové grupy \mathcal{C}_4	73
2.15.4	Korelace symetrie mezi krystalografickými bodovými grupami	74
2.16	Rodina nekystalografické bodové grupy \mathcal{C}_5	75
2.17	Rodina Curieových grup symetrie	76
2.18	Kambiantní grupy	77
2.18.1	Černo-bílé grupy antisymetrie	77
2.18.2	Šedé grupy antisymetrie	83
2.18.3	Přehled krystalografických grup symetrie a antisymetrie	84
2.19	Permutačně inverzní grupy	86
2.20	Translační grupy	87
2.21	Prostorová mřížka	89
2.22	Elementární buňka	90
2.23	Symetrická elementární (primitivní) Wignerova–Seitzova buňka	93
2.24	Hierarchie syngonií	96
2.25	Prostorové grupy	97
2.25.1	Operace symetrie v prostorových grupách \mathcal{G}_3^3	97
2.25.2	Teorémy o produktech operací symetrie v prostorových grupách	100
2.25.3	Geometricky a krystalograficky ekvivalentní prostorové grupy	101
2.25.4	Symbolika prostorových grup	102
2.25.5	Homomorfie prostorových a bodových grup	104
2.25.6	Symorfnní prostorové grupy	104
2.25.7	Nesymporfnní prostorové grupy	106
2.25.8	Ukázka konstrukce a popisu prostorové grupy	107
2.25.9	Enantiomorfnní prostorové grupy	110
2.25.10	Podgrupy prostorových grup	110
2.25.11	Reprezentace prostorových grup	113
2.25.12	Bodové grupy \mathcal{G}_0^1 a \mathcal{G}_0^2	114
2.25.13	Prostorové grupy \mathcal{G}_1^1 , \mathcal{G}_1^2 a \mathcal{G}_1^3	114
2.25.14	Prostorové grupy \mathcal{G}_2^2 a \mathcal{G}_2^3	115
2.25.15	Prostorové grupy antisymetrie	118
2.25.16	Přehled počtu krystalografických grup symetrie	119
3	SYMETRIE STRUKTURY KRYSTALŮ	120
3.1	Krystalová struktura	120
3.2	Morfologie krystalu a bodová grupa symetrie	121
3.2.1	Leptové obrazce	123
3.3	Difrakční symetrie	123

3.4	Princip symetrie	125
3.4.1	Vlastní symetrie tenzorů	125
3.4.2	Vztah mezi bodovou symetrií krystalu a symetrií jeho fyzikálních vlastností. Neumannův princip	126
3.4.3	Curieův princip superpozice symetrie	128
3.4.4	Neumannův–Minnigerodův–Curieův princip	129
3.5	Optické vlastnosti krystalů a bodové grupy symetrie	129
3.5.1	Barva krystalu v procházejícím světle. Pleochroismus. Lesk	129
3.5.2	Index lomu světla v krystalech	131
3.5.3	Optická aktivita	131
3.6	Piezoelektrický efekt	133
3.7	Pyroelektrický efekt	134
3.8	Feroelektrika	134
3.9	Izostrurnost a izomorfie	135
3.10	Polymorfie a fázové přechody	136
3.11	Rotace částic v krystalech a polymorfie	138
3.12	Krystalová symetrie některých strukturních typů v kubické, tetragonální a hexagonální soustavě	139
3.13	Zastoupení prostorových grup v krystalových strukturách	146
3.14	Reálné krystaly	147
3.15	Krystalové poruchy	148
3.16	Struktury OD	149
3.16.1	Klasifikace struktur OD	152
3.16.2	Rozdělení struktur OD	154
3.16.3	Symetrie struktur OD a polytypů	154
3.16.4	Superpoziční struktura	158
3.16.5	Familie struktur OD z ekvivalentních vrstev	158
3.16.6	Výskyt struktur OD	159
3.17	Poznámka o kvazikrystalech	159
4	VIBRAČNÍ SPEKTRA KRYSTALICKÝCH LÁTEK	160
4.1	Úvod	160
4.2	Podstata vibračně rotačních spekter částic a normální vibrace	161
4.3	Infračervená a Ramanova spektra	164
4.4	Symetrie normálních vibrací	165
4.4.1	Symetrie normálních vibrací rigidních částic	165
4.4.2	Symetrie normálních vibrací nerigidních částic	168
4.4.3	Symetrie normálních vibrací krystalu	168
4.5	Symetrie vyšších vibračních stavů	170
4.6	Výběrová pravidla	172
4.6.1	Výběrová pravidla pro translační a prostorovou grupu krystalu	174
4.7	Alternativní zákaz	175
4.8	Fermiho rezonance	175
4.9	Charakterističnost normálních vibrací	176

4.10	Intenzity ve vibračních spektrech. Dichroismus infračervených pásů a polarizace Ramanových linií	176
4.11	Izotopické posuny frekvencí	178
4.12	Vliv skupenského stavu na vibrační spektra	179
4.13	Interpretace vibračních spekter krystalu na základě analýzy elementární buňky	181
4.14	Interpretace vibračních spekter použitím korelační analýzy	181
4.14.1	Site-grupová analýza	181
4.14.2	Faktor-grupová analýza	182
4.14.3	Postup při korelační analýze	183
4.14.4	Korelační analýza PbHPO_3 a PbDPO_3	184
4.14.5	Korelační analýza grafitu	189
4.14.6	Korelační analýza jodidu rtuťnatého	190
4.14.7	Korelační analýza diamantu	191
4.15	Štěpení vnitřních degenerovaných vibrací polyatomických částic mřížkovými vibracemi	191
4.16	Studium krystalové symetrie polyatomických částic v krystalu	192
4.16.1	Studium molekulární symetrie \mathcal{G}_M polyatomických částic	193
4.16.2	Studium snížení molekulární symetrie na vlastní symetrii \mathcal{G}_V	194
4.16.3	Studium site-symetrie \mathcal{G}_S v čisté látce	194
4.16.4	Studium site-symetrie \mathcal{G}_S v hostitelské struktuře	194
4.16.5	Studium faktorové symetrie \mathcal{G}_F	195
4.16.6	Studium vibračních spekter látky a spektra jejího izotopového analogu	195
4.16.7	Studium polymorfních přeměn	196
4.16.8	Pseudosymetrie	196
4.16.9	Možnosti určení krystalové symetrie použitím vibrační spektroskopie	196
5	DODATKY	198
5.1	Funkce a funkční prostory	198
5.2	Operátory	199
5.3	Matice	200
5.4	Tenzory	202
6	TABULKY	204
	LITERATURA	252
	REJSTŘÍK	259
	REJSTŘÍK STRUKTUR.	263