

SIMETRIJE V KRISTALIH

stanja opredeljena preko makroskopskih lastnosti (emergenca).

Mehanske lastnosti trdne snovi: viskoznost $\eta \rightarrow \infty$, rigidnost.

Ne skče pod vplivom strižnih sil, se deformira.

Linearni odziv: prožnostni modul E , strižni modul G .

Posledica reda, zlozna simetrije.

Se psploši: Andersonova psplošena rigidnost, elastičnost parametra reda povezanega z zlozno simetrijo. Pogosto en sam parameter. Koliko različnih členov, ki so drugega reda v gradientu (E, G) ? $\downarrow$ Energija je najnižja, ko je simetrija zlozljena na enak način v celotnem vzorcu.

Zlom translacijske simetrije $\Rightarrow$ znižanje simetrije $\Rightarrow$ večja urejenost.

Podgrupa, $G_1 < G_0$. Grupa "parametra reda", faktoriska grupa G_0/G_1 , uresniči količino izgubljene simetrije. Parameter reda je dinamična spremenljivka (v Hamiltonianu) in termodinamična (v prosti energiji).

Rigidnost je ključna posledica zlozne simetrije. Omogoča nastanek strukture, prenos informacije in energije.

Realen kristal se plastično deformira (defekti: dislokacije).

$$\gamma = \eta \frac{dv_x}{dy}$$

$\uparrow$

strižna
napetost
[W/m²]

$$G = \frac{\gamma}{\gamma}$$

$\nwarrow$ strižna deformacija

Zapis: celice $u=1,2,\dots,N$ N : št. celic

atomi v celici $k=1,2,\dots,K$ K : št. atomov na osnovno/primitivno celico

$\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$ osnovni/bazni/primitivni vektorji

Kristalna mreža α, β indeks komponente

$$\vec{R}_{uk} = \vec{R}_u + \vec{r}_k$$

$$\vec{R}_{uk} = \vec{R}_{uk}^0 + \vec{u}_{uk}(t)$$

$$\langle \vec{u}_{uk} \rangle = 0 \quad \langle \vec{u}_{uk}^2 \rangle < \infty \quad \text{za } N \rightarrow \infty$$

1) SIMETRIJSKE OPERACIJE

Aktivne transformacije: premaknemo kristal glede na fiksen koordinatni sistem. $\vec{r}' = R \vec{r}$ $R = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & & \\ a_{31} & & \end{bmatrix}$

Govora je o invarianci proste strukture

- TRANSLACIJA $\vec{r} \rightarrow \vec{r} + \vec{T}$ $\rho(\vec{r}) = \rho(\vec{r} + \vec{T})$

$$\vec{T}_n = n_1 \vec{a}_1 + n_2 \vec{a}_2 + n_3 \vec{a}_3$$

$$\vec{a}_i' = \sum_j \alpha_{ij} \vec{a}_j \quad \alpha_{ij} \text{ cela števila (da se vedno opiše isto m.)} \\ + \text{ohranitev volumna celice} \quad |\underline{\alpha}| = \pm 1$$

$SL^+(3, \mathbb{Z})$ ($SL(3, \mathbb{Z})$ ohranja tudi orientacijo,iralnost)

- TOČKOVNE OPERACIJE

Simetrijski element: točka, ravna, premica, glede na katero opravimo simetrijsko operacijo

Fiksna točka, običajno izhaja kot izhodšče

Izometrije (dranjajo razdaljo): zasuk, zrcaljenje

• identiteta: E (Schönflies) ali 1 (mednarodni)

• zasuk, C_n (C iz cyclic) n : red zasuca

↑ Schönfliesov zapis

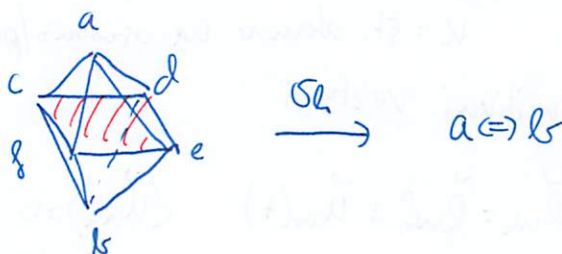
$n = 2, 3, 4, 6$ C_n^p za kot $\alpha = 2\pi p/n$

kot $\alpha = 2\pi/n$
counter (clockwise) ?

↺ deminirajate

• zrcaljenje σ (Spiegel) m (mirror)

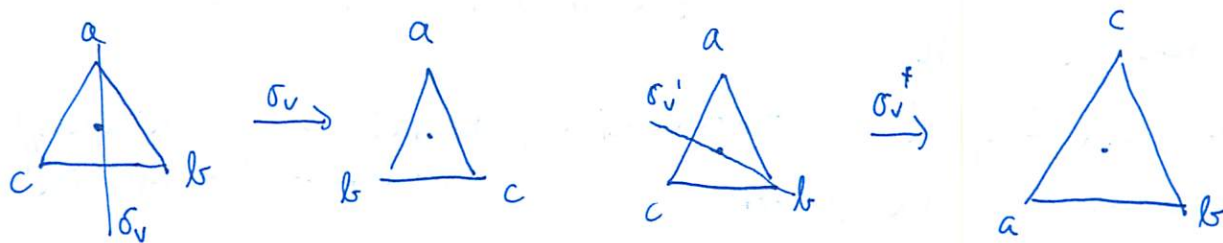
σ_h : $\perp$ na ravnini os najvišjega reda $2/m$



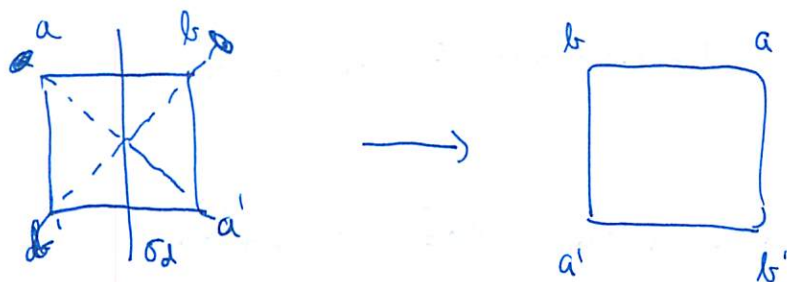
σ_v : vselbuje sučuo s najvišjega reda

2m

2.



σ_d : razpolavlja kot med dvema prečnima rot. osema C_2



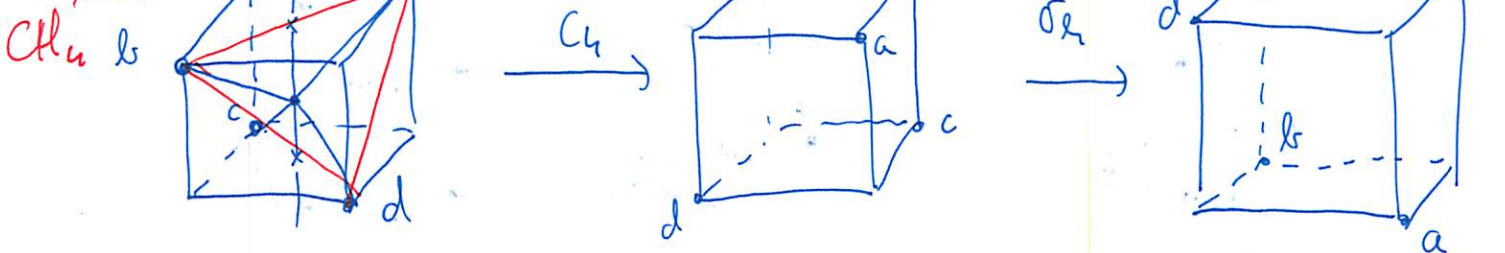
= zrcalno silevanje

• Sučuo zrcaljenje $S_u = C_u \sigma_h = \sigma_h C_u$ (istini red ni pomemben)

$S_1 = \sigma \rightarrow$ navadno zrcaljenje!

$S_u^n = \sigma_h$ če n lih, $S_u^n = E$ če n sod
 $\uparrow$ identiteta (Einheit)

beveled
diagonal
antiprism
Tetraheder
abcd



• Silevanje z inverzijo

$$\bar{n} = n \cdot I$$

• Inverzija I $\vec{r} \rightarrow -\vec{r}$

$$I = S_2 = C_2 \sigma_h$$

$$C_2 \sigma_h = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = I$$

Trojček $I = C_2 \sigma_h$ $I \sigma_h = C_2$ $I C_2 = \sigma_h \rightarrow$ če dva, obstaja tudi tretji

$$I^2 = E$$

Hermann-Mauguinov (mednarodni) zapis

zelo uporaben v kristalografiji

Zasled C_n n

Zasled $\bar{2}$ in IC_n $\bar{n}$ ("inverzija", drugače kot v Schönflies,)
tj. imamo "reflection"

Zrcalna σ m (mirror)

σ_h u/m

σ_v u/m

Pravokotna σ $\times 2$ Recimo: $422 \Rightarrow C_4, C_2', C_2''$

$\bar{2}$ je isto kot m

Smer simetrijskega element določa položaj v zapisu

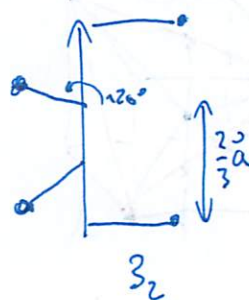
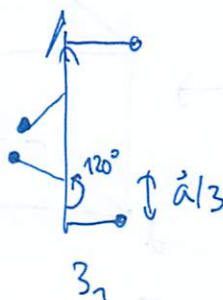
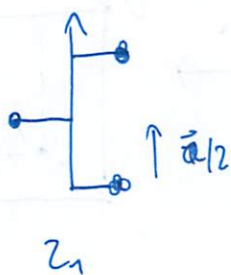
Prvo mesto: primarna smer (po dogovoru z)

Drugo mesto: sekundarne smeri, $\perp$ na z . $2, m$ ali $\frac{2}{m}$.

Tretje mesto: terciarne smeri med sekundarnimi. $2, m$ ali $\frac{2}{m}$.

- SESTAVLJENE OPERACIJE

• Vijacna $\sim$ ZASUK $C_{np} = C_n T_{p\vec{a}/n}$



zrcaljenje

• Druga $T = \sigma T_{\vec{a}/2}$ $\downarrow$ druga ravnina $\downarrow$ aksialna druga (a/b/c-glide)

u -glide $\equiv$ diagonalna druga $(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)/2, (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/2, \text{etc.}$

d -glide $\equiv$ diagonalna druga $(\vec{a}_1 + \vec{a}_2 + \vec{a}_3)/4, (\vec{a}_1 + \vec{a}_2)/4, \text{etc.}$

e -glide (double glide)

2) TEORIJA GRUP

Produkt, nevtralni element (identiteta), asociativnost, inverzni element.

Tablica množenja, izomorfnost.

Abelova, če vsi elementi komutirajo. Primeri operacij, ki komutirajo: (Aravas 5.2.3)

- zasuk okoli iste osi
- zasuk C_2 in σ_v
- zasuk in σ_h
- inverzija in poljubna točkarna operacija
- zaporedni zrcaljenja glede na $\perp$ ravni
- zasuk okoli $\perp$ 2-števih osi: $C_2 C_2' = C_2' C_2 = C_2''$, $C_2'' \perp$ na C_2 in C_2'

Razredi: A, B v istem razredu, če $\exists R$ tako da $B = R A R^{-1}$

Osnovna pravila:

- E, I, σ_h vedno sami v razredu (ker komutirajo)
- C_n^k, C_n^{-k} v istem razredu, če $\exists$ sim. ravnina, ki vsebuje os C_n , ali če $\exists C_2$, ki je $\perp$ na os C_n
- σ in σ' v istem razredu, če $\exists$ operacija, ki premakne vse točke z ene ravni na drugo

Direktni produkt: $G_A \times G_B = \{A_i B_j\} = \{C_k\}$ $k=1, \dots, N_A N_B$

3) STEREOGRAMI

Predstavitev 3D simetrije v 2D.

Filmsko točko obkrožimo s sfero.

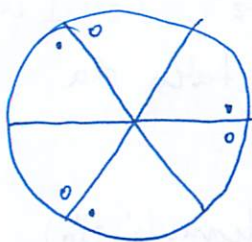
Simetrijske osi sekajo sfero v točkah.

Točke povežemo z južnim polom.

Presečišče premice z ekvatorialno ravnino opremimo s simbolom.

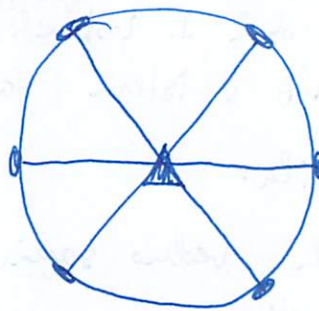
Gledamo s severnega pola.

Primer: D_3



• nad ravnino
○ pod ravnino

včasih 0+ in 0-



 ali  dvojje

 2-šterna

 S_3

Ekvatorialna ravnina: debela črta

 3-šterna

 S_4

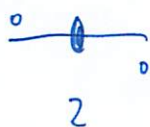
Če v ekv. ravnini: debel kraj.

 4-šterna

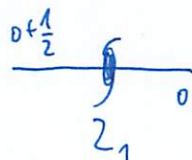
 S_6

 6-šterna

Druge simetrije:

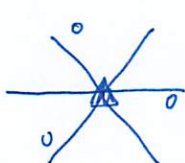


2

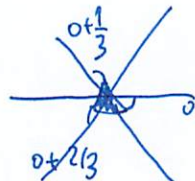


2_1

Rotacija za $2\pi/n$, translacija za a/n



3



3_1

4) TOČKOVNE GRUPE

Kristalni razred $\equiv$ kristalografska grupa točkova

4.

- Snova C_n ciklična, $(C_n^1)^n = E$ izomorfna $\mathbb{Z}_n$
 $\uparrow$ generator
 $N=n$ $U_r=n$

$$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6 \Leftrightarrow 1, 2, 3, 4, 6$$

- Zrcalna C_s

$$\sigma = C_s = C_{1h} \Leftrightarrow \bar{2} = m$$

- Snova-zrcalna S_n

a) $n=2p+1$ lih

$$S_n^n = \sigma_h$$

Isto kot C_{nh}

$$S_3 = C_{3h} = C_{6i} \Leftrightarrow \bar{6} = \frac{3}{m}$$

$\uparrow$ Alternativna definicija:
 Zanka za h/n + inverzija

b) $n=2p$ sod ciklična

$$N=n$$

$$U_r=n$$

$$S_2, S_4, S_6 \Leftrightarrow \bar{1}, \bar{4}, \bar{3}$$

$$\bar{C}_e \quad n=4p+2, \quad (S_{4p+2})^{2p+1} = C_2 \sigma_h = I$$

za $p=0$ se
 to $S_2(\bar{1})$
 $= \{E, I\}$.

- Snova + hor. zrcalna $C_{nh} = C_n \times \sigma_h$ direktni produkt

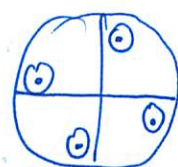
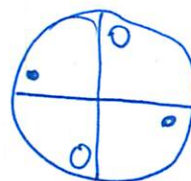
$$N=2n, \quad \{C_n^k, C_n^k \sigma_h\}$$

$$U_r=2n, \quad \text{Abelova}$$

$$\bar{C}_e \quad n \text{ sod, vsebuje inverzijo.} \quad n=2p \quad C_{2p}^p \sigma_h = C_2 \sigma_h = I$$

$$\text{Spomni se: } C_{nh} \equiv C_s$$

$$C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h} \Leftrightarrow \frac{2}{m}, \bar{\frac{3}{m}}, \frac{4}{m}, \frac{6}{m}$$



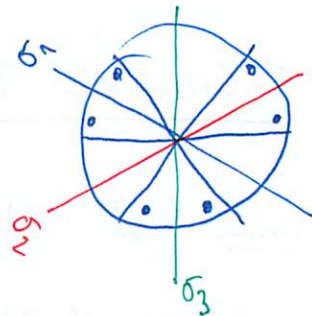
• Sučna + vert. zrcalna C_{nv}

a) lih $n=2p+1$ $N=2n$ $\{C_n^k, C_n^{-k}, \sigma_v\}$

$n=2p+1$ zrcalnih ravnin

$n_r = 2+p$ $E, \{C_n^k, C_n^{-k}\}$ za $k=1, \dots, p$, $n\{\sigma_v\}$

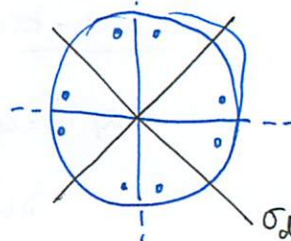
$C_{3v} \Leftrightarrow 3m$



b) sod $n=2p$ $N=2n$

$n_r = p+3$ $E, C_2, \{C_n^k, C_n^{-k}\}$ za $k=1, \dots, p-1$, $p\sigma_v, p\sigma_d$

$C_{2v}, C_{4v}, C_{6v} \Leftrightarrow 2mm, 4mm, 6mm$



• Inverzija $C_i \Leftrightarrow \bar{1}$ $\{E, I\}$ izomorfnu $\mathbb{Z}_2$

• Diedrska D_n grupa simetrije pravilnega n -kotnika, snežinka!

2-šterne osi $\perp$ na n -šterno $N=2n$

Izomorfnu C_{nv} , enaka razdelitev po razredih (Aroras 5.2.4)

$D_2, D_3, D_4, D_6 \Leftrightarrow 222, 32, 422, 622$

$D_2 \equiv V$ vier

štiri elementi, 2 zanka, 2 zrcali. (Discouraged notation.)

Klein Viererguppe, Klein group, $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$

simetrija pravokotnika, Abelova, vsak element sam sili invert, produkt dveh je tretji (od identitete različni) element. Najmanjša grupa, ki ni ciklična.



• Diedrska D_{nh}

σ_h vodi k n zrcalnim ravninam σ_v

$N=4n$

$D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h} \Leftrightarrow \underbrace{\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}_{\text{ravnina}}, \bar{6}m2, \underbrace{\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}_{4/mmm}, \underbrace{\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}_{6/mmm}$

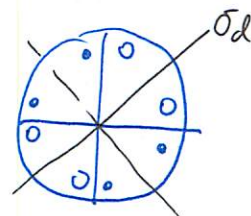


polna vs. omejena mednarodna

• Diedra D_{2d}

Zrcalne ravnine razpolavljajo kot med osmi C₂

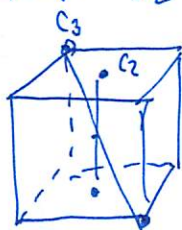
$$D_{2d}, D_{3d} \Leftrightarrow \bar{4}2m, \underbrace{\bar{3}(2/m)}_{\bar{3}m}$$



Sledi 5 "kubičnih grup":

• Tetraedrska T $\Leftrightarrow 23$

Grupi D₂ dodamo 3-sterne osi.



$$N=12$$

$$n_r=4$$

$$E, 3C_2, 4C_3, 4C_3^2$$

$\rightarrow$ C₂ os. je tudi S₄ os, če dodamo zrcalne ravnine (kot v T_d)

• Polna tetraedrska T_d $\Leftrightarrow \bar{4}3m$

Vse simetrije tetraedra = T + zrcaljenja

$$N=24 \quad n_r=5 \quad E, 8\{C_3, C_3^2\}, 6\sigma, 6\{S_4, S_4^3\}, 3C_2$$

• Tetraedrska T_h = T x C_i $\Leftrightarrow \underbrace{\bar{4}3m}_{m\bar{3}}$

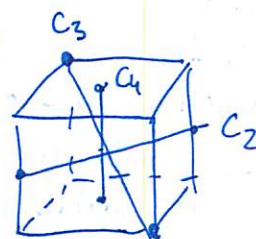
$$N=24 \quad n_r=8$$

• Kubična O $\Leftrightarrow 432$

$$N=24 \quad n_r=5 \quad E, 8\{C_3, C_3^2\}, 8C_4, 6C_2, 6\{C_4, C_4^3\}$$

• Polna kubična O_h = O x C_i $\Leftrightarrow \underbrace{\bar{4}3m}_{m\bar{3}} \underbrace{\bar{2}}_{m}$

$$N=48 \quad n_r=10$$



	$n=1$	$n=2$	$n=3$	$n=4$	$n=6$
C_n	C_1	C_2	C_3	C_4	C_6
C_{nv}	$C_{1v} = C_{1h}$	C_{2v}	C_{3v}	C_{4v}	C_{6v}
C_{nh}	$C_{1h} = C_s$	C_{2h}	C_{3h}	C_{4h}	C_{6h}
S_n	$S_1 = C_s$	$S_2 = C_i$	$S_3 = C_{3h}$	S_4	S_6
C_{ni}	$C_{1i} = C_i$	$C_{2i} = C_s$	$C_{3i} = C_6$	$C_{4i} = S_4$	$C_{6i} = S_6$
D_n	$D_1 = C_2$	D_2	D_3	D_4	D_6
D_{nh}	$D_{1h} = C_{2v}$	D_{2h}	D_{3h}	D_{4h}	D_{6h}
D_{nd}	$D_{1d} = C_{2h}$	D_{2d}	D_{3d}	X	X
				8-stena 00	12-stena 01

27 različnih + 5 kumulativnih = 32 točkavil grup

Lastnosti:

- Dipolni moment: grupa ne sme imeti dveh vzporednih rotacijskih osi. Ne sme biti inverzijske.

Polarna grupa: vse sim. operacije pustijo invariantno več kot dve točki (točke na polarni osi).

Dovoljena ferroelektričnost, piezoelektričnost.

- Enantiomorfne (kiralne): samo ena os (brez znanih zasledov ali inverzijskih zasledov).

lahko so optično aktivne (vključno polarizacijsko razporeditev - M valov).

- Necenrosimetrične so laticoplane, kiralne, obeje ali nič od tega.

Kako pridemo do 32?

- 11 čistih rotacijskih
- 11 z dodano inverzijo (cenrosimetrične)
- cenrosimetrične imajo 10 različnih necenrosimetričnih podgrup, ki so različne od čistih rotacijskih

7 kristalnih sistemov

(6.)

3-šterne $\langle 111 \rangle$

kubični

T

Td

Th

O

Oh

boji simetrično

(skrajno desni vsebuje

točkani simetriji Bravaisove mreže) $P_L = \text{holohedny}$

6 ali $\bar{6}$

heksagonalni

C_6^*

C_{3h}

C_{6h}

D_6

C_{6v}^*

D_{3h}

D_{6h}

3 ali $\bar{3}$

trigonalni

C_3^*

S_6

D_3

C_{3v}^*

D_{3d}

4-šterne ali $\bar{4}$

tetragonalni

C_4^*

S_4

C_{4h}

D_4

C_{4v}^*

D_{2d}

D_{4h}

dve 2-šterne ali $\bar{2}$

ortorombni

D_2

C_{2v}

D_{2h}

2-šterne ali $\bar{2} = m$

monoklinni

C_2^*

C_s^*

C_{2h}

triklinni

C_1^*

C_i

centrosimetričen

necentrosimetričen

kiralen

polarne točkane grupe

Romboedri je poseben primer trigonalnega (Glazer p. 42)

Izomorfizmi:

$$O_h \cong S_4 \times C_2$$

$$D_{4h} \cong C_4 \times C_2 \times C_2$$

$$D_{2h} \cong C_2 \times C_2 \times C_2$$

$$C_{2h} \cong C_2 \times C_2$$

$$C_i \cong C_2$$

5. PROSTORSKE GRUPE

točkarna simetrija + translacijska simetrija

Pojavi se lahko novi simetrijski elementi.

Seitz operator:

$$A = \{ R | \vec{T} \}$$

$$\vec{r}' = A \vec{r} = R \vec{r} + \vec{T}$$

$$\text{množenje: } \{ R | \vec{T} \} \{ R' | \vec{T}' \} = \{ RR' | R\vec{T}' + \vec{T} \}$$

V splošnem ne komutirajo.

morajo tvoriti grupo.

$$\text{identiteta: } E = \{ E | \vec{0} \}$$

To je "kristalografska točkarna grupa" $\mathcal{P}$.

$$\text{inverz: } A^{-1} = \{ R^{-1} | -R^{-1}\vec{T} \}$$

$\mathcal{P} < \mathcal{P}_L$ → simetrija Bravaisove mreže

Tvorijo grupo.

→ dodaj Wigner-Seitzove celice

$$\begin{aligned} \text{Razcep: } \{ R | \vec{T} \} &= \{ R | \vec{T}_u + \vec{\alpha}(R) \} \\ &= \{ E | \vec{T}_u \} \{ R | \vec{\alpha}(R) \} \end{aligned}$$

Če $\vec{\alpha} = 0$: simorfne (točkarna je podgrupa prostorske) 73

Če $\vec{\alpha} \neq 0$: nesimorfne (faktorizirana grupa G/T izomorfna stočk.) 157

↳ primeri: HCP, diamant

$Z = 230$

$$\text{Matrična reprezentacija v } \mathbb{R}^3: \{ R | \vec{T} \} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ \vec{T} & R \end{pmatrix}$$

$T \triangleleft \mathcal{G}$ translacijska grupa
trivijalna podgrupa prostorske grupe

V splošnem prostorska ni direktni produkt točkarne in translacijske grupe.

seminodirni produkt

V $\mathcal{P} \times T$ velja $(R_2, T_2)(R_1, T_1) = (R_2 R_1, T_2 + T_1)$
ne moremo deliti frakcijskih translacij.

Vijajna in druge simetrije sta možni tudi v simorfni prostorski, vendar jih lahko generiramo z kombinacijami simorfne operacije in translacije.

Nomenklatura:

P primitivna

I telesno centrirana Inncenzentrierung

F ploskarno centrirana

R romboedrična (poseben primer trigonalne)

A, B, C centrirana na ploskvi A, B, C

m zrcalna ravnina

a, b, c ^{osna} 4-droma ravnina

n diagonalna drsna (n-droma)

d diamantna drsna

2, 3, 4, 6 rotacijska os

2, 1, 3, 1, 3, 1... vijaka os

6. TRANSLACIJSKA GRUPA

Produktna, cikelčna, komutativna $T = T_1 \times T_2 \times T_3$ Podgrupa prostorske.

Euodimenzijske upodoblitve $D(T_1) = S_1$ $S_1^{N_1} = 1$ $S_1 = e^{i2\pi l_1/N_1}$ p.b.c.

$D(\vec{T}_n) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{R}_n}$ $\vec{k} = \frac{l_1}{N_1} \vec{b}_1 + \frac{l_2}{N_2} \vec{b}_2 + \frac{l_3}{N_3} \vec{b}_3$ $\vec{b}_i$ osnovni vektorski recipročne mreže

$\vec{k}' = \vec{k} + \vec{G}$ minus, da bo kompatibilno z naslednjim razdelkom

$\vec{k}, \vec{k}' \Rightarrow$ ista upodoblitev

$\vec{G} \in$ mreži $\vec{G}$ Toliko upodoblitev kot vektorjev v B.C.

B.C. ima simetrijo točkane grupe mreže.

Opomba: točkarna grupa ohranja mrežo točk (tudi če ni podgrupa prostorske). $R\vec{T}_n$ je vedno translacija mreže.

$$\{R|\vec{a}\}\{E|\vec{T}_n\}\{R|\vec{a}\}^{-1} = \{E|R\vec{T}_n\}$$

$T \triangleleft \mathcal{G}$: T je normalna podgrupa prostorske

7. ENOELEKTRONSKA STANJA V KRISTALU

Prosti elektroni, $H = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\vec{r})$

Lastne funkcije uveljavljajo vezaveprijem upodobitvam prostorske grupe.

a. Translacijska simetrija

$$T_n \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(\vec{r} - \vec{R}_n) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{R}_n} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (*)$$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_{\vec{k}}(\vec{r})$$

To je Blochov izrek.

$u_{\vec{k}}$ periodična funkcija, "cell function"

Recall: Sim. operacija $\vec{r}' = \vec{r} + \vec{R}_n$ $T_n f(\vec{r}') = f(\vec{r}) \Leftrightarrow T_n f(\vec{r}) = f(T_n^{-1} \vec{r})$

zato ker $T_m T_n f(\vec{r}) = T_m f(T_n^{-1} \vec{r}) = f(T_n^{-1} T_m^{-1} \vec{r}) = f((T_m T_n)^{-1} \vec{r})$

b. Točkova simetrija

$$R \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \psi_{\vec{k}}(R^{-1} \vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot R^{-1} \vec{r}} u_{\vec{k}}(R^{-1} \vec{r}) = e^{i(R \cdot \vec{k}) \cdot \vec{r}} \tilde{u}_{R\vec{k}}(\vec{r})$$

★ Zvezda valanega vektorskega $\vec{k}$: $\vec{k}' = R\vec{k}$ $E_{R\vec{k}} = E_{\vec{k}}$ Ista energija za vse vektorske v zvezdi.
"Sprotna točka", če vsi vektorski v zvezdi različni.

Reducibilni del B.C. $\Rightarrow$ velika poenostavitel računanja.

(wedge)

(velikina: za faktor 1/48)

$E_{\vec{k}}$ ima polno simetrijo točkove grupe (tudi če kristal ni invarianten na nekatere izmed $\{R | \vec{0}\}$).

Madlung p.80

$$\begin{aligned} S_{\{R|\vec{a}\}} f(\vec{r}) &= f(\{R|\vec{a}\}^{-1} \vec{r}) & S_{\{E|T_n\}} S_{\{R|\vec{a}\}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= S_{\{R|\vec{a}\}} S_{\{E|T_n\}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ & & &= S_{\{R|\vec{a}\}} e^{i\vec{k} \cdot R^{-1} T_n \vec{r}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (*) \\ S_{\{E|T_n\}} \psi_{\vec{k}}(R\vec{k}, \vec{r}) &= e^{-iR\vec{k} \cdot T_n \vec{r}} \psi_{\vec{k}}(R\vec{k}, \vec{r}) \\ & & &= \underbrace{S_{\{R|\vec{a}\}}}_{=1} e^{-iR\vec{k} \cdot T_n \vec{r}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ & & &= e^{-iR\vec{k} \cdot T_n \vec{r}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned}$$

$$\Rightarrow \psi_{\vec{k}}(R\vec{k}, \vec{r}) = \lambda^{\{R|\vec{a}\}} S_{\{R|\vec{a}\}} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad |\lambda^{\{R|\vec{a}\}}|^2 = 1$$

$$E_{\vec{k}}(R\vec{k}) = \langle \psi_{\vec{k}}(R\vec{k}, \vec{r}) | H | \psi_{\vec{k}}(R\vec{k}, \vec{r}) \rangle = \langle S \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) | H | S \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \rangle = \langle S^{-1} S \psi_{\vec{k}} | H | \psi_{\vec{k}} \rangle = E_{\vec{k}}(\vec{k})$$

8. TEORIJA UPODOBITEV

8.

$$(P_n f_i)(\tilde{r}') = f_i(\tilde{r})$$

f_i : baza upodobitve (n-dim), tvorijo vektorski prostor

$$P_n f_k = \sum_{j=1}^n D_{jk}^{(R)} f_j$$

sim. operacija
↑
homomorfizem

$$G = \{g_i\} \quad \tilde{G} = \{M_i\} \quad g_i g_j = g_k \Rightarrow M_i M_j = M_k \quad M_i = D(g_i)$$

Ekvivalentni upodobitvi, če $\exists S$, tako da $D' = S^{-1} D S$ za $\forall g_i$

$$\text{Razcepna: } D(g_i) = D^{(1)}(g_i) \oplus D^{(2)}(g_i) = \begin{bmatrix} D^{(1)}(g_i) & 0 \\ 0 & D^{(2)}(g_i) \end{bmatrix}$$

$$\text{sled (karakter): } \chi(g_i) = \text{Tr } D(g_i) = \text{Tr } D'(g_i)$$

Enaka za vse ekvivalentne upodobitve. Enaka vrednost za vse elemente razreda.

$$\text{Izrek o ortogonalnosti: } \sum_{k=1}^N D_{\alpha\beta}^{(i)*}(g_k) D_{\gamma\delta}^{(j)}(g_k) = \frac{N}{n_i} \delta_{ij} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta}$$

$$\text{Vsotno pravilo: } \sum_{i=1}^s n_i^2 = N$$

s ← št. nerazcepnih upodobitev
N ← dim. nerazcepne

Ortogonalnost karakterjev (matrice):

$$\sum_{k=1}^N \chi^{(i)*}(g_k) \chi^{(j)}(g_k) = N \delta_{ij} \quad \Rightarrow \quad \sum_{k=1}^N |\chi^{(i)}(g_k)|^2 = N$$

(če ni izpolnjeno, reprezentacija ni nerazcepna)

Karakterji v istem razredu so enaki, zato velja

$$\sum_{k=1}^{n_r} p_k \chi^{(i)*}(g_k) \chi^{(j)}(g_k) = N \delta_{ij}$$

n_r ← št. razredov
p_k ← št. elementov v razredu

Velja $S = n_r$.

Razcep upodobitve: $\chi(g_k) = \sum_{i=1}^s c_i \chi^{(i)}(g_k)$ [To je očitno iz definicije razcepnosti + dejstva da so χ linearno neodvisni za ekvivalenčne upodobitve.]

$$c_i = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^{n_r} p_k \chi^{(i)*}(g_k) \chi(g_k)$$

Projektor: $P^{(i)} = \sum_R \chi^{(i)}(R)^* P_R$

Ortogonalnost med stolpci:

$$\sum_{i=1}^s \chi^{(i)}(g_k)^* \chi^{(i)}(g_{k'}) = \frac{N}{p_k} \delta_{kk'}$$

Velja $N = \sum_{k=1}^{n_r} p_k$

Konstrukcija tabel karakterjev:

C_{3v}	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
A_1	1	1	1
A_2	1	a	b
E	2	c	d

$$\sum n_i^2 = N = 6$$

1-2: $1 + 2a + 3b = 0$

2-2: $1 + 2a^2 + 3b^2 = 6$

$$\Rightarrow a=1, b=-1, c=-1, d=0$$

1-3: $1 + 2c + 3d = 0$

3-3: $1 + 2c^2 + 3d^2 = 6$

Matriten zapis:

A/B dvodimenzionalne

A: $\chi = +1$ pri rotaciji najnižjega reda

B: $\chi = -1$

-11-

indeksi 1,2 glede na χ pri rotaciji doli osi y ali pri σ_v

E dvodimenzionalne

9. UPODOBITVE

9.

Nekateri vektorji v zvezdi ekvivalentni: $R\vec{k} = \vec{k} + \vec{G}_m$

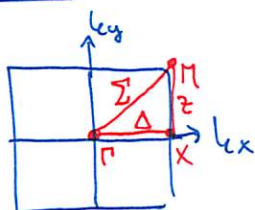
Te sim. operacije tvorijo grupo valovnega vektorja, $G_k < G$. $N_k \leq N$.

$P_R \psi_k(\vec{r}) = e^{iR\vec{k} \cdot \vec{r}} \psi_k(R^{-1}\vec{r}) = \underbrace{e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}}_{\text{isti fazni faktor}} \psi_k(R^{-1}\vec{r})$

"small representation"

$$U_{k\alpha}(R^{-1}\vec{r}) = \sum_{\beta=1}^{N_k} D_{\beta\alpha}^{(i)}(R) U_{k\beta}(\vec{r})$$

Primer: $C_{4v} \Rightarrow C_{4mm}$



$$D(\{\tilde{R}|\vec{T}\}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{T}} D(\tilde{R})$$

velja v uokrajnosti B.C., na površini pa za simorfne.

$\tilde{R}$ so elementi grupe valovnega vektorja $\vec{k}$, $G_k < G$.

C_{4v}	E	C_2	$2C_4$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$	
$(\Gamma_1) A_1$	1	1	1	1	1	$1, x^2+y^2, z$ $N_r=5$
$(\Gamma_2) A_2$	1	1	1	-1	-1	$xy(x^2-y^2)$
$(\Gamma_3) B_1$	1	1	-1	1	-1	x^2-y^2
$(\Gamma_4) B_2$	1	1	-1	-1	1	xy
$(\Gamma_5) E$	2	-2	0	0	0	$\{x, y\}$

V točki Γ : $\psi_i(\vec{r}) = e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} u_i(\vec{r}) = e^{i(\vec{k} + \vec{G}_m) \cdot \vec{r}} \Rightarrow u_i = e^{i\vec{G}_i \cdot \vec{r}}$

$\vec{G}_1 = (\frac{2\pi}{a}, 0)$ $\vec{G}_3 = (-\frac{2\pi}{a}, 0)$
 $\vec{G}_2 = (0, \frac{2\pi}{a})$ $\vec{G}_4 = (0, -\frac{2\pi}{a})$ $k = \frac{2\pi}{a}$

Za bazo izberemo $B = \{ \cos(kx), \cos(ky), \sin(kx), \sin(ky) \}$

Upodobilno Γ_{red} v bazi B:

$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \chi=4$ $C_2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \chi=0$ $C_4 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \chi=0$ $C_4^3 = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \chi=0$
 $\sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \chi=2$ $\sigma_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \chi=2$ $\sigma_d = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \chi=0$ $\sigma_d' = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \chi=0$

$$C_1 = \frac{1}{8} \begin{matrix} & E & C_4 & C_4 & \sigma_v & \sigma_d \\ \begin{matrix} 1 & 4 & 1 & + & 1 & \cdot 0 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 0 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 2 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 0 & \cdot 1 \end{matrix} \end{matrix} = 1$$

$$C_2 = \frac{1}{8} \begin{matrix} 1 & 4 & 1 & + & 1 & \cdot 0 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 0 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 2 & \cdot (-1) & + & 2 & \cdot 0 & \cdot (-1) \end{matrix} = 0$$

$$C_3 = \frac{1}{8} \begin{matrix} 1 & 4 & 1 & + & 1 & \cdot 0 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 0 & \cdot (-1) & + & 2 & \cdot 2 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 0 & \cdot (-1) \end{matrix} = 1$$

$$C_4 = \frac{1}{8} \begin{matrix} 1 & 4 & 1 & + & 1 & \cdot 0 & \cdot 1 & + & 2 & \cdot 0 & \cdot (-1) & + & 2 & \cdot 2 & \cdot (-1) & + & 2 & \cdot 0 & \cdot 1 \end{matrix} = 0$$

$$C_5 = \frac{1}{8} \begin{matrix} 1 & 4 & 2 & + & 1 & \cdot 0 & \cdot (-2) & + & 2 & \cdot 0 & \cdot 0 & + & 2 & \cdot 2 & \cdot 0 & + & 2 & \cdot 0 & \cdot 0 \end{matrix} = 1$$

$$\text{Torej } \Gamma_{\text{red}} = \Gamma_1 \oplus \Gamma_3 \oplus \Gamma_5$$

$$\text{Recall: projektor } P^{(i)} = \sum_R \chi^{(i)}(R)^* P_R$$

Vzamemo: $\cos(kx)$

$$u^{(1)} = \cos kx + \cos kx + \cos ky + \cos ky + \text{isto.}$$

$$\Rightarrow u^{(1)} \propto \cos kx + \cos ky$$

$$u^{(1)} \propto x^2 + y^2$$

$$u^{(3)} = \begin{matrix} C_2 & C_4 \\ \cos kx + \cos kx - \cos ky - \cos ky + \cos kx + \cos kx \\ \sigma_d & \sigma_d' \\ -\cos ky - \cos ky \end{matrix}$$

$$\Rightarrow u^{(3)} \propto \cos kx - \cos ky$$

$$u^{(3)} \propto x^2 - y^2$$

Pri Γ^5 $\cos kx$ ne deluje (dobimo 0)

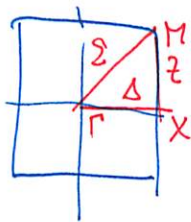
$$\text{Vzamemo } \sin kx \rightarrow \begin{matrix} C_2 \\ 2\sin kx + (-2)(-\sin kx) \propto \sin kx \propto x \end{matrix}$$

$$\sin ky \rightarrow \begin{matrix} C_2 \\ 2\sin ky + (-2)(-\sin ky) \propto \sin ky \propto y \end{matrix}$$

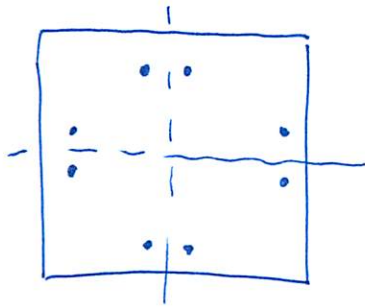
Do km 20.2.2024 (spustil uvodni del tega razdelka)

Nesimorfne prostorske: dodatne frakcijske translacije dodajo fazne premike, ki jih ni v operacijah čiste točkove grupe. Fazni faktori so odvisni od točke $\vec{r}$. Novi pojavi v pasovni strukturi: band sticking, Diracove in Weylove točke (pomembno za TI in polkovine). Nesimorfne operacije lahko delujemo zahtevajo degeneracijo v nekaterih $\vec{k}$ točkah.

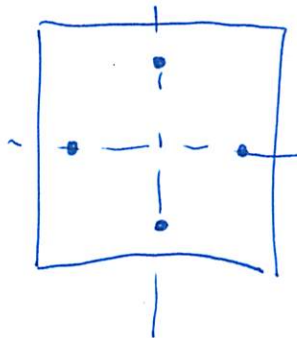
C_{4v}



g_{lis}



Splošna točka.
V zvezdi N=8 točk.

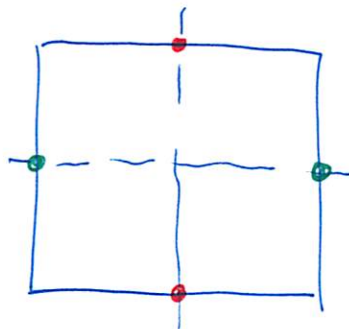


Točka Δ.

V zvezdi N=4 točke.

V vsaki točki ∃ σ_v
ki pusti točko invarianto.

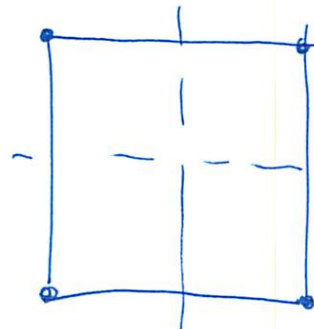
$$G_K = C_2 = m$$



Točka X.

V zvezdi 2 neodnivalni točki

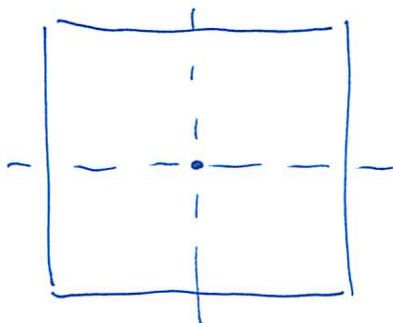
$$G_K = \{E, C_4, \sigma_v, \sigma_v'\} = C_{2v}$$



Točka M.

1 neodnivalna točka

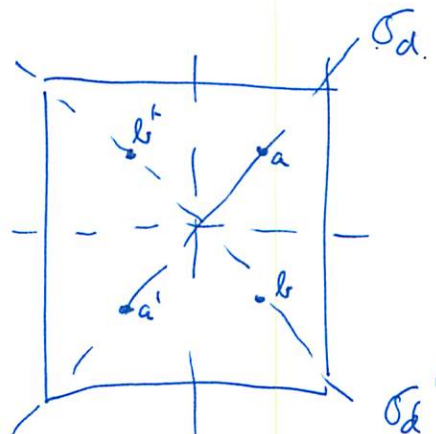
$$G_K = G$$



Točka Γ.

1 (neodnivalna) točka.

$$G_K = G$$



Točka Σ.

4 točke

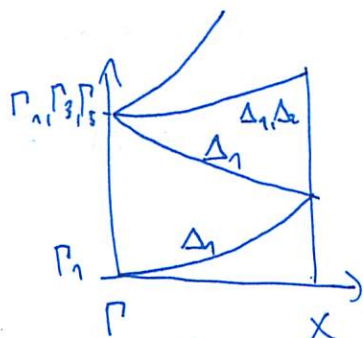
$$G_K = \{E, \sigma_d\} \text{ in } a, a' \quad G_K = \{E, \sigma_d\} \text{ in } b, b'$$

10. KOMPATIBILNOSTNE ZVEZE

10.

C_{2v}	E	C_2	σ_x	σ_y
X_1	1	1	1	1
X_2	1	1	-1	-1
X_3	1	-1	1	-1
X_4	1	-1	-1	1

C_2	E	$\sigma_x, \sigma_y, \sigma_d$
$\Delta_1, \Sigma_1, \tilde{z}_1$	1	1
$\Delta_2, \Sigma_2, \tilde{z}_2$	1	-1



ireducibilne
Kakne reprezentacije so med seboj združljive?
Recept: ^{ireduc}reprezentacije grupe z višjo simetrijo
postanejo reducibilne v grupi z manjšo
simetrijo.

To je relevantno tudi pri dravnih faznih prehodih:
na katane ^{Ure}načine se lahko zmanjša simetrija.
Kaj se dr temu zgodi z stanji?

11. MATRIČNI ELEMENTI ZA PREHODE

$$M = \langle \psi_{\alpha}^{(i)} | O^{(b)} | \psi_{\beta}^{(j)} \rangle$$

$M=0$, če $D^{(i)} \otimes D^{(b)} \otimes D^{(j)}$ ne vsebuje $D^{(1)}$

(zadosten pogoj za $M \neq 0$,
ni pa potreben!)

Ekvivalentno: $M \neq 0$, če $D^{(i)*} \otimes D^{(b)} \otimes D^{(j)}$ ne vsebuje $D^{(1)}$ (popolnoma
simetrične
reprezentacije).

Dokaz: za vsako $Q(x)$ velja $\int Q(x) dx = \int P_R Q(x') dx' = \int P_R Q(x) dx$
(Bishop p. 158)

Ali sištebo: $\sum_R \int P_R Q(x) dx = N \int Q(x) dx \Rightarrow P^1 = \sum_R P_R$

$$M = \int \psi_{\alpha}^{(i)*} O^{(b)} \psi_{\beta}^{(j)} dx = \frac{1}{N} P^1 \int \psi_{\alpha}^{(i)*} O^{(b)} \psi_{\beta}^{(j)} dx$$

izpel: $D^{(a)} \otimes D^{(b)}$ vsebuje $D^{(1)}$, če $D^{(a)} = D^{(b)*}$.

12. SIMETRIJA NA OBRAT ČASA

$$T: t \rightarrow -t$$

$[H, T] = 0$, če $|\psi\rangle$ lastno stanje, potem tudi $T|\psi\rangle$

$$T x T^{-1} = x \quad T p T^{-1} = -p$$

$$T [x, p] T^{-1} = T i \hbar T^{-1} = -[x, p] = -i \hbar \Rightarrow T i T^{-1} = -i$$

Antilinear operator T : $\langle T x | T y \rangle = \langle x | y \rangle^* = \langle y | x \rangle$
 $f(x+y) = f(x) + f(y)$
 $f(cx) = c^* f(x)$

↳ antilinear in unitaren kvari

Zapišemo kot $T = U K$

↑ kompleksna konjugacija

$$T^2 = U K U K = U U^* = U (U^\dagger)^{-1} = \phi \quad \phi \text{ je fazna matrika (diagonalna matrika s fazami)}$$

→ dovoljeno, ker faze ne vplivajo na verjetne lastnosti

$$U = \phi U^\dagger \xrightarrow{T} U^\dagger = U \phi \Rightarrow U = \phi U^\dagger = \phi U \phi$$

$$\Rightarrow \phi = \pm 1 \Rightarrow T^2 = \pm 1$$

$$\text{Schrödingerjeva: } i \hbar \frac{\partial \psi(\vec{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}, t) + V(\vec{r}) \psi(\vec{r}, t)$$

$$-i \hbar \frac{\partial \psi^*(\vec{r}, -t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi^*(\vec{r}, -t) + V(\vec{r}) \psi^*(\vec{r}, -t)$$

$\Rightarrow \psi^*(\vec{r}, -t)$ je tudi rešitev

Blochovo stanje $\Rightarrow E_{\vec{k}} = E_{-\vec{k}}$, tudi če ni centra inverzije

$$\text{Delci s spinom: } T \vec{S} T^{-1} = -\vec{S}^* \Rightarrow T = e^{-i n S_y} K$$

$$\text{Za } S=1/2: e^{-i n S_y \hbar} = i S_y$$

$$T^2 = e^{-i n S_y} K e^{-i n S_y} K = e^{-i n S_y} e^{i n S_y} = e^{-2 i n S_y} \quad \text{Za } S=1/2 \quad T^2 = -1$$

Kramersov izrek: $T = U K$ in $U = -U^\dagger$ (ker $\phi = -1$)

$$\langle \psi | T \psi \rangle = \sum \psi_m^* U_{mn} K \psi_n = \sum \psi_m^* U_{nm} \psi_n^* = \sum \psi_n^* (-) U_{nm} \psi_m = -\langle \psi | T \psi \rangle = 0$$

Garantirano 2x degenerirano, pri istem $\vec{k}$.

V 2. levanhizaciji:

(11.)

$$T d_{\uparrow}^{\dagger} T^{-1} = -d_{\downarrow}^{\dagger}$$

$$T d_{\downarrow}^{\dagger} T^{-1} = d_{\uparrow}^{\dagger}$$

$$\hat{S}_x = \frac{1}{2} (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} + d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow})$$

$$\hat{S}_y = \frac{i}{2} (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\downarrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\uparrow})$$

$$\hat{S}_z = \frac{1}{2} (d_{\uparrow}^{\dagger} d_{\uparrow} - d_{\downarrow}^{\dagger} d_{\downarrow})$$

$$T \hat{S}_i T^{-1} = -\hat{S}_i \quad i=x, y, z$$

Do km, 26.2.2024 (1. ura)

Za spinske matrice:

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

$$T \sigma_i T^{-1} = -\sigma_i \quad i=x, y, z$$

13. NEUMANNNOVO NAČELO

Simetrični elementi fizikalne lastnosti kristala energije vpljučevati vse simetrične lastnosti točkane grupe kristala.

Omejitev stavila od nič različnih komponent tenzorjev + povezave med njimi.

* $\vec{S} \rightarrow -\vec{S}$ je mogoče zaradi spin-orbit člena v Hamiltonianu:

$$\hat{H}_{SO} = \frac{\hbar^2}{4m_e^2 c^2} \vec{\sigma} \cdot \nabla V \times \vec{p}$$

$$\uparrow$$

$$T \vec{\sigma} T^{-1} = -\vec{\sigma}$$

$$T = U U^{-1} \quad U U \vec{\sigma} U^{-1} U^{-1} = U (\sigma_x^2 - \sigma_y^2 + \sigma_z^2) U^{-1} = -\vec{\sigma} \Rightarrow \begin{cases} U \sigma_x U^{-1} = -\sigma_x \\ U \sigma_y U^{-1} = \sigma_y \\ U \sigma_z U^{-1} = -\sigma_z \end{cases} \Rightarrow U = e^{i\theta \sigma_y}$$

↑
poljubna
faza

Izberemo $e^{i\theta} = i \Rightarrow U = i\sigma_y$ det $U = 1$